



**Universidad**  
Zaragoza



Facultad de Ciencias  
**Universidad** Zaragoza

## Universidad de Zaragoza

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DEL UNIVERSO: COSMOLOGÍA,  
ASTROFÍSICA, PARTÍCULAS Y ASTROPARTÍCULAS

TRABAJO DE FIN DE MÁSTER:

# ELECTRODINÁMICA CUÁNTICA CON GUÍAS DE ONDA MAS ALLÁ DE LA APROXIMACIÓN A DOS NIVELES

Autor:

Iván Huarte Franceschini

Directores:

Sergi Terradas Briansó

David Zueco Lainez

Junio 2024

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Aspectos teóricos</b>	<b>3</b>
2.1. Cuantización del campo electromagnético . . . . .	4
2.2. Término de interacción . . . . .	5
2.3. Hamiltoniano Espín-Bosón . . . . .	6
<b>3. Guía óhmica</b>	<b>8</b>
<b>4. Transformación de Lanczos</b>	<b>9</b>
<b>5. Matrix Product States</b>	<b>11</b>
5.1. Descomposición MPS y SVD . . . . .	12
5.2. Observables con MPS . . . . .	15
5.3. Hamiltoniano en forma MPO . . . . .	16
5.4. Estados fundamentales con DMRG . . . . .	17
<b>6. Resultados</b>	<b>19</b>
6.1. Dos niveles . . . . .	20
6.2. Tres niveles . . . . .	23
6.3. Cuatro niveles . . . . .	26
<b>7. Conclusiones</b>	<b>29</b>
<b>8. Bibliografía</b>	<b>30</b>
<b>A. Pretextos teóricos</b>	<b>33</b>
A.1. Ecuación de Dirac . . . . .	33
A.2. Hamiltoniano de Fermi . . . . .	33
<b>B. Guía de ondas</b>	<b>34</b>
B.1. Obtención de los acoplos $g_k$ . . . . .	34

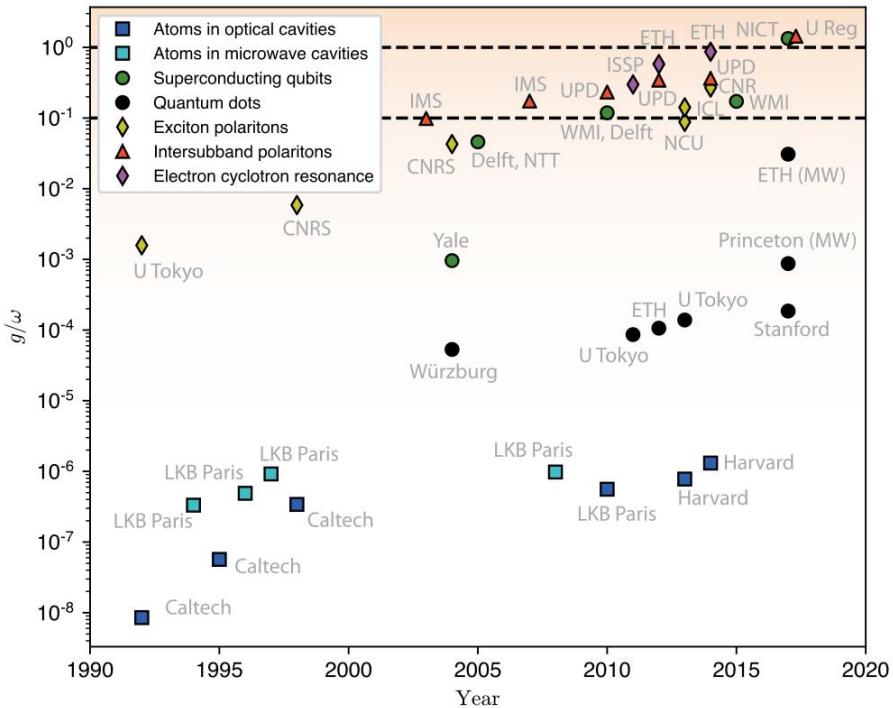
## 1. Introducción

La descripción física de la interacción entre la luz y la materia es uno de los problemas más importantes desde los inicios de la mecánica cuántica. Los avances en el conocimiento teórico y los métodos experimentales en este área ha sido siempre un reto, gracias a los cuales hoy somos capaces de controlar sistemas atómicos y fotónicos con gran precisión. En este trabajo se abordará el estudio de sistemas de dos (qubits), tres y cuatro niveles en interacción con un campo electromagnético multimodo que se propaga por una guía de ondas. Este campo de investigación se conoce como electrodinámica cuántica con guías de onda y representa una rama de interés en la óptica cuántica. Algunas plataformas reconocidas para implementar estos sistemas incluyen guías de onda basadas en cristales fotónicos, nanofibras ópticas, líneas de transmisión con circuitos, nanohilos plasmónicos, circuitos superconductores, entre otros [1]. La ventaja principal de utilizar estos sistemas es el confinamiento unidimensional de los fotones, los cuales se busca que se acoplen eficientemente a átomos colindantes.

Desde el punto de vista de las aplicaciones, estos sistemas que interactúan a través de guías de onda son ideales para implementar redes cuánticas, comunicación cuántica y computación cuántica [2]. Para ello, es imperante que las guías de onda que transportan la información lo hagan de forma reversible y sin perder la coherencia, lo cual posibilita la distribución del entrelazamiento por la red. En este sentido, el mayor reto en los últimos tres décadas ha sido incrementar el control de la fuerza con la que el átomo se acopla a la guía al mismo tiempo que se reducen las pérdidas. Este aumento ha ido propiciando descubrimientos y fenomenologías nuevas a medida que se lograban hacer sistemas más fuertemente acoplados, lo cual abrió la posibilidad de explorar diferentes regímenes de acople caracterizados en función de la relación entre la fuerza de acople ( $g$ ), las frecuencias propias del átomo y la guía ( $\Delta$  y  $\omega_0$ ) y sus grados de pérdidas de radiación ( $\kappa$  y  $\gamma$ )[3].

Los primeros regímenes que se pudieron explorar fueron de acople débil o *weak-coupling* (*WC*) aquellos en los que el acople es más pequeño que las pérdidas ( $g \ll \kappa, \gamma$ ), por lo que la energía se perdía antes de que pudiese intercambiarse entre la materia y el campo electromagnético. Posteriormente se pudieron alcanzar *weak-strong coupling regimes* (*WSC*), con intensidades de acople suficientes para poder observar oscilaciones de Rabi [4] e incluso, poder despreciar las pérdidas de energía ( $g \ll \kappa, \gamma$ ) (*SC*) Estos regímenes de acoplos, cuyo acople normalizado por la frecuencia cumple  $g/\omega_0 \lesssim 0.1$ , fueron alcanzados en sistemas físicos como átomos en cavidades ópticas, puntos cuánticos (*quantum dots*) y polariton. En estos experimentos, los resultados se describían perfectamente mediante una teoría en bajo orden de perturbaciones y pasaron más de dos décadas hasta comenzar a investigar la posibilidad de acceder a regímenes de acoplos mayores. La cronología de resultados experimentales para el acople se muestra en la Figura 3.

En 2005, gracias a avances tecnológicos en las técnicas experimentales, se consiguió hacer comparable el valor del acoplamiento con las frecuencias propias del átomo y la guía sobre pasando el umbral de  $g/\omega_0 = 0.1$  y, abriendo la posibilidad a explorar este régimen conocido como *ultra-strong coupling* (*USC*). En este régimen la dinámica entre el átomo y el campo electromagnético



**Figura 3:** Cronología del acoplamiento conseguido en los principales experimentos. Fuente de la figura: [5].

cambia drásticamente y el orden bajo de perturbaciones no es suficiente para describirla. Además, otras asunciones que se hacían a acoplamientos bajos como considerar solo una frecuencia en la guía ya no es válida y es necesario incluir múltiples modos [3]. En régimen *USC* se abre la posibilidad de explorar nueva fenomenología que no era posible ver en el régimen *SC*. Aparecen efectos no lineales y no perturbativos como la generación de frecuencias, se modifica el estado fundamental del sistema y aparecen nuevas transiciones de fase. Además el tratamiento teórico en *USC* es en la mayoría de situaciones intratable, por lo que se necesitan nuevos tratamientos teóricos y métodos numéricos para explorarlo.

Por último, más allá del *USC* se encuentra el régimen de acoplamiento profundo o *deep-strong coupling (DSC)*, donde el acoplamiento ( $g/\omega_0 \geq 1$ ) son tan intensos que los términos no perturbativos se vuelven dominantes en la dinámica.

En este trabajo nos centraremos en el estudio de la dinámica entre un sistema de dos, tres y cuatro niveles que interacciona con una guía de ondas en régimen *USC* utilizando técnicas teóricas y numéricas que permitan observar su dinámica.

## 2. Aspectos teóricos

El objetivo de esta sección es crear una trazabilidad entre las ecuaciones fundamentales que rigen la dinámica de las partículas cargadas con espín y las ecuaciones que describen el modelo de interacción luz-materia que se estudia en este trabajo. Como punto de inicio consideremos la ecuación de Dirac, la cual describe la amplitud de probabilidad de una partícula de spin 1/2 [6]:

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = 0 \quad (1)$$

donde  $\gamma^\mu$  son las matrices de Dirac,  $\partial_\mu = (\frac{1}{c}\partial_t, -\nabla)$  es la derivada covariante,  $m$  la masa de la partícula,  $c$  la velocidad de la luz y  $\psi$  la amplitud. La deducción de esta ecuación se recoge en el anexo A.1.

Esta ecuación tuvo numerosas consecuencias: combina relatividad especial con mecánica cuántica, predice la existencia de antimateria, explica la existencia del espín y proporciona su momento magnético, el acoplamiento órbita-espín y, en lo que atañe en este trabajo, la interacción entre la luz y la materia [7].

Considerando ahora el caso de un electrón sometido a un potencial externo ( $V$ ) e introduciendo invarianza gauge, la ecuación (66) toma la siguiente forma

$$(i\hbar\mathcal{D} - m_e c - eV)\psi(x) = 0, \quad (2)$$

donde  $\mathcal{D} \equiv \partial_\mu + ieA_\mu(x)$  y  $A_\mu(x)$  es el potencial magnético en forma de cuadrivector que hace explícita la invarianza gauge de la ecuación de Dirac. Esta ecuación la cumplen partículas de energía positiva y negativa, por lo que para una descripción completa definiremos los dos spinores de dos componentes ( $\tilde{\phi}_A$  y  $\tilde{\phi}_B$ ) de energía positiva y negativa, respectivamente. La ecuación (2) toma la siguiente forma:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\phi}_A \\ \tilde{\phi}_B \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \tilde{\phi}_B \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \tilde{\phi}_A \end{pmatrix} + m_e c^2 \begin{pmatrix} \tilde{\phi}_A \\ -\tilde{\phi}_B \end{pmatrix} + eV \begin{pmatrix} \tilde{\phi}_A \\ \tilde{\phi}_B \end{pmatrix}, \quad (3)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma}$  son las matrices de Pauli y  $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$  son los momentos tras la transformación gauge.

En este trabajo no se considerará materia relativista. En la ecuación de Dirac en su límite no relativista, el término predominante es la energía en reposo  $mc^2$ , por lo que mediante la siguiente rotación podemos restringirnos únicamente a soluciones de energía positiva:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi}_A \\ \tilde{\phi}_B \end{pmatrix} = e^{-i\frac{m_e c^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix}, \quad (4)$$

por lo que (3) se reescribe como:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \phi_B \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \phi_A \end{pmatrix} - 2m_e c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_B \end{pmatrix} + eV \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix}, \quad (5)$$

En la segunda mitad de la relación, los términos con  $c$  predominan, por lo que  $\hbar\dot{\phi}_B$  y  $eV\phi_B$  se pueden despreciar. Por lo tanto la solución para la segunda expresión:

$$\phi_B = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2m_e c} \phi_A \quad (6)$$

Comprobándose que  $\phi_B \sim \frac{1}{c}\phi_A$ , por lo que  $\phi_A$  y  $\phi_B$  son las componentes mayor y menor del spinor, respectivamente. Sustituyendo (6) en (5) obtenemos la expresión simplificada incluyendo solo soluciones de energía positiva.

$$i\hbar \frac{\partial \phi_A}{\partial t} = \left( \frac{1}{2m_e} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) + eV \right) \phi_A \quad (7)$$

Desarrollando los productos  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})$  detallados en el anexo A.2 se obtiene la ecuación de Pauli.

$$i\hbar \frac{\partial \phi_A}{\partial t} = \left( \frac{1}{2m_e} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + eV \right) \phi_A \quad (8)$$

Y por lo tanto, el hamiltoniano de Pauli:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + eV + \frac{\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (9)$$

y se ha introducido el magnetón de Bohr  $\mu_B = e\hbar/2m_e c$  y el campo magnético  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ . De esta forma, desde la ecuación de Dirac se puede recuperar el hamiltoniano de Pauli simplemente imponiendo límite no relativista e invarianza gauge. En esta expresión se incluye el término de acople mínimo  $(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2/2m_e$  que da la interacción del electrón con el campo electromagnético,  $eV$  el término del potencial eléctrico y el término de Zeeman  $\frac{\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ .

El hamiltoniano de Pauli es crucial para entender cómo partículas con espín  $1/2$  interactúan con campos electromagnéticos. Permite describir fenómenos como el efecto Zeeman, donde los niveles de energía se dividen en presencia de un campo magnético externo debido a la interacción de su espín con el campo. El hamiltoniano de Pauli es el punto inicial de muchos trabajos de luz-materia, y como se puede observar en el término de Zeeman, el espín surge de forma natural de la ecuación de Dirac. Sin embargo, este término no se tendrá en cuenta en este trabajo ya que estamos interesados en la descripción de un dipolo acoplado a un campo electromagnético.

## 2.1. Cuantización del campo electromagnético

Para realizar una correcta descripción del modelo que se describe en apartados posteriores se necesita, además, cuantizar el campo electromagnético y la interacción entre la partícula y el campo.

Situandonos en el gauge de Coulomb [8]  $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \rightarrow \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0$  la expresión del potencial escalar ( $\phi$ ) y el potencial magnético vector ( $\mathbf{A}$ ) en función de los operadores creación y

destrucción en base de momentos

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \sum_k \sqrt{\frac{1}{2m\omega_k}} (a_k e^{ikx} + a_k^\dagger e^{-ikx}) \quad (10)$$

$$\mathbf{A}_\perp(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_k \sqrt{\frac{1}{2\epsilon_0\omega_k}} \mathbf{u}_k (a_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_k^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) , \quad (11)$$

donde  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica en el vacío,  $\mathbf{u}_k$  es un vector unitario que da la dirección a la que apunta el campo  $\mathbf{A}$  para cada modo  $k$ , y se denota como  $\mathbf{A}_\perp$  la componente transversal del potencial magnético vector, dado que es la única componente que no se anula tras aplicar el gauge de Coulomb. Es bien sabido que mediante los potenciales definidos en (11) uno es capaz de llegar a la expresión del hamiltoniano que describe el campo electromagnético [9]

$$H_{EM} = \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k \quad (12)$$

donde se ha omitido el término constante  $\sum_k \omega_k/2$  ya que no interviene en la dinámica.

## 2.2. Término de interacción

Una vez se ha tratado la cuantización del campo electromagnético, se procede a describir y cuantizar la interacción entre el átomo y el campo. Esto es, el proceso de absorción y emisión de uno o más fotones por parte de un átomo. Para ello, se necesita que el campo eléctrico aparezca explícitamente, por lo que se manipulará el hamiltoniano de Pauli (9) cambiando del gauge de Coulomb al gauge longitudinal [10][11].

$$\mathbf{A} \longrightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi \quad (13)$$

$$\phi \longrightarrow \phi - \partial_t \chi . \quad (14)$$

Escogiendo  $\chi = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}$  y haciendo una aproximación de onda larga al potencial transformado  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \sim \mathbf{A}$  constante a lo largo del átomo [12], entonces

$$A \longrightarrow 0 \quad (15)$$

$$\phi \longrightarrow \phi - \mathbf{r} \cdot \mathbf{E} , \quad (16)$$

donde el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  viene dado por las ecuaciones de Maxwell

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla V(\mathbf{r}, t) , \quad (17)$$

Dicho campo lo podemos expresar con los operadores creación y destrucción mediante (11) y (17) como

$$\mathbf{E} = \frac{-i}{\sqrt{l^3}} \sum_k \sqrt{\frac{\omega_k}{2\epsilon_0}} \mathbf{u}_k (a_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_k^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) . \quad (18)$$

En esta descripción gauge la interacción proviene del término del potencial  $eV$  en (9). De esta forma,  $(\mathbf{d} \cdot \mathbf{E})$  y el hamiltoniano de interacción se puede escribir como

$$H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) , \quad (19)$$

con  $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$  momento dipolar del átomo.

### 2.3. Hamiltoniano Espín-Bosón

Cuantizados el campo electromagnético y el término de interacción entre el dipolo y el campo, solo resta describir el término del hamiltoniano que da cuenta de la energía del átomo y los procesos de absorción y emisión que se producen. El hamiltoniano una partícula sin interacción sometida a un potencial externo es

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x) . \quad (20)$$

Si se diagonaliza y se consideran únicamente el estado fundamental y el primer excitado ( $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ ), se puede proyectar el hamiltoniano sobre dichos estados

$$\sum_{i,j} \langle i | H_0 | j \rangle |i\rangle \langle j| = e_0 |0\rangle \langle 0| + e_1 |1\rangle \langle 1| = (e_1 - e_0) |1\rangle \langle 1| = \Delta \sigma^+ \sigma^- = \frac{\Delta}{2} \sigma_z \quad (21)$$

Por lo que el hamiltoniano del sistema de dos niveles se puede escribir

$$H_0 = \frac{\Delta}{2} \sigma_z \quad (22)$$

donde  $\Delta = e_1 - e_0$  es el gap de energía entre el estado fundamental y el excitado.

Por otro lado, podemos hacer lo mismo con el hamiltoniano de interacción. En este caso se conoce que el potencial es central e invariante bajo  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ , por lo que su paridad esta bien definida y  $\mathbf{r}$  es función impar. De esta forma, se tiene que  $\langle i | \mathbf{r} | i \rangle = 0$  y  $|d| = e\langle 0 | \mathbf{r} | 1 \rangle$ , por lo que  $H_{int} \sim \sigma_x$ . Además, trasladando el sistema de referencia al átomo ( $\mathbf{r} = 0$ ), se eliminan las fases de (18) y el hamiltoniano de interacción (23) se escribe

$$H_{int} = \sum_k g_k \sigma^x (a_k + a_k^\dagger) \quad (23)$$

donde la intensidad de acople a cada modo

$$g_k = |d| \frac{-i}{\sqrt{L^3}} \sqrt{\frac{\omega_k}{2\epsilon_0}} \hat{z} \cdot \mathbf{u}_k , \quad (24)$$

donde se han fijado los ejes de forma que  $\hat{\mathbf{d}} \sim \hat{z}$ .

Así pues, llegados a este punto tenemos todos los elementos necesarios para describir el

sistema. Si se suman los términos hallados anteriormente en (12), (23) y (22), resulta

$$H = \frac{\Delta}{2} \sigma_z + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k g_k \sigma^x (a_k + a_k^\dagger) . \quad (25)$$

A este hamiltoniano se le conoce como el hamiltoniano de Espín-Bosón [13][14] y describe la interacción existente un sistema de dos niveles a un conjunto de modos. Realizando la sustitución  $\sigma^x = \sigma^+ + \sigma^-$  en función de los operadores creación y destrucción del espín, se pueden ver explícitamente los procesos que se recogen en este modelo

$$H = \frac{\Delta}{2} \sigma_z + \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k g_k (\sigma^+ a_k + \sigma^- a_k^\dagger + \sigma^- a_k + \sigma^+ a_k^\dagger) \quad (26)$$

Los dos primeros términos de interacción entre el átomo y el campo ( $\sigma^+ a_k + \sigma^- a_k^\dagger$ ) se denominan corrotantes y conservan el número de excitaciones del sistema, es decir, las excitaciones destruidas en el campo son creadas en el átomo, y viceversa. De hecho, son los que representan los procesos de absorción y emisión, respectivamente. En cambio, los otros dos términos ( $\sigma^- a_k + \sigma^+ a_k^\dagger$ ) son contrarrotantes e introducen o eliminan dos excitaciones simultáneamente, una en el campo y la otra en la materia.

Como se ha mencionado en la introducción de este trabajo, se pueden diferenciar varios regímenes dependiendo de la intensidad del acople entre el átomo y el campo electromagnético.

Si la interacción se puede tratar perturbativamente nos encontramos en régimen de acople fuerte o *strong coupling* (SC), donde la intensidad de acople es pequeña y los términos corrotantes dominan la dinámica del sistema. Si consideramos que el sistema es aislado ( $\kappa, \gamma \rightarrow 0$ ), se produce un intercambio coherente de excitaciones entre el átomo y el campo. En esta situación, los términos contrarrotantes contribuyen en un orden de perturbaciones superior que los corrotantes y, por lo tanto, se pueden despreciar. A esto se le denomina *Rotating Wave Approximation (RWA)* [15].

Bajo esta aproximación el hamiltoniano completo conserva el número de excitaciones, se puede resolver la dinámica analíticamente por bloques de un número de excitaciones constante y podemos describir la función de onda mediante un *ansatz* de la siguiente forma para el caso de una sola excitación:

$$|\psi\rangle = \beta|1; 0_k\rangle + \sum_k \beta_k|0; 1_k\rangle , \quad (27)$$

donde en los elementos de la base se separan las excitaciones en el átomo ( $|0\rangle, |1\rangle$ ) y el campo ( $|0_k\rangle, |1_k\rangle$ ). En el primer término la excitación se encuentra en el átomo, mientras en los sucesivos la excitación se encuentra en el modo  $k$ -ésimo. El estado fundamental es el estado  $|\psi_{gr}\rangle = |0; 0_k\rangle$  sin excitaciones al que se aproxima el sistema al dispersarse por todos sus grados de libertad.

Sin embargo, si el acoplamiento es muy grande, la aproximación *RWA* no tiene validez y los términos contrarrotantes son necesarios para describir la dinámica. A este régimen se le denomina régimen de acople ultrafuerte o *ultra-strong coupling (USC)* y es el que se va a explorar

en este trabajo.

En este régimen de acoplamientos las soluciones de el hamiltoniano (25) dejan de ser analíticas dado que no se conserva el número de excitaciones y se debe recurrir a métodos numéricos para simularlos. Además, en estos sistemas el estado fundamental ya no es el estado sin excitaciones. Ahora, pueden existir un número indeterminado en cada momento, lo que provoca que el estado fundamental esté poblado y abra la posibilidad a nuevas transiciones de fase. Este acople ultrafuerte puede llegar a comprometer la aproximación de dos niveles, dado que el acople puede superar por mucho la frecuencia de transición dipolar y dar lugar a otras transiciones. Por ello, en este trabajo se estudiará también la posibilidad de que el sistema pueda tener tres o cuatro niveles.

### 3. Guía óhmica

En este apartado se considera un sistema de dos niveles como sistema principal. Esto podría corresponder a una partícula en un doble pozo de potencial. En lo que sigue, escogeremos la base de forma que los autoestados de  $\sigma_z$  sean aquellos que, correspondan a que la partícula esté localizada en uno de los dos pozos de potencial ( $|0\rangle$  o  $|1\rangle$ ).

Sin embargo, aunque en el mundo real cualquier sistema interactúa con su entorno, por ejemplo, introduciendo efectos térmicos [13] que produzcan decoherencia. En lo que sigue se asume que la partícula únicamente interacciona con un campo bosónico (23). Considerando esta interacción, para valores pequeños de acople los autoestados seguirán siendo los estados de  $\sigma_z$ . En cambio, si el acople es muy grande, el término de interacción predomina y en este caso, los autoestados del hamiltoniano (25) pasarán a ser los de  $\sigma_x$   $|\pm\rangle = (|0\rangle \pm |1\rangle)/\sqrt{2}$ , es decir, estados deslocalizados. Esto es una transición de fase *localización-deslocalización*. Además, consideraremos el campo bosónico puede moverse libremente por una linea de transmisión o guía de ondas continua y homogénea, cuyo medio de propagación es no dispersivo, es decir, con relación de dispersión lineal

$$\omega(k) = v_g |k|, \quad (28)$$

con  $v_g$  velocidad de grupo. El medio viene caracterizado por la función espectral  $J(\omega)$  que rige el acoplamiento con el átomo y se define como

$$J(\omega) = 2\pi \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega - \omega_k). \quad (29)$$

La función espectral cuantifica la densidad de acople de las frecuencias, así como la forma en la que se distribuye la energía por los diferentes modos que forman la onda que se propaga por la guía. Esta función depende fuertemente del entorno específico que se esté utilizando y puede ser obtenida tanto con un conocimiento *a priori* de las interacciones microscópicas o, mediante las ecuaciones del movimiento de un sistema dado [13].

Por lo general, el rango válido de frecuencias para  $J(\omega)$  se acota a frecuencias menores que

la frecuencia “cutoff” del sistema, que denotaremos como  $\omega_c$ , siendo ésta mucho mayor que  $\Delta$ . Dado un conjunto de parámetros, siempre encontraremos una escala temporal  $\tau$  del sistema en la que se tenga recogida toda la dinámica. En nuestro caso  $\tau = \Delta^{-1}$ , por lo tanto, se elige  $\omega_c$  para que procesos con escalas de tiempo mayores que  $\omega_c$  no afectan a la dinámica que nos interesa. De hecho, todos nuestros resultados solo serán válidos bajo la condición  $\Delta \ll \omega_c$  e impondremos  $\Delta/\omega_c = 0.1$ .

El comportamiento para frecuencias iguales o mayores que  $\omega_c$  en la práctica no es inferible de experimentos o ecuaciones, por lo que se truncará el espectro a dicha frecuencia  $J(\omega > \omega_c) = 0$ . Para el caso que nos concierne exigiremos únicamente que la función espectral sea una función suave de  $\omega$ , y que cumpla una ley de potencias de la forma [13]

$$J(\omega) \sim \omega^\chi \quad \text{con } 0 < \omega < \omega_c, \quad (30)$$

donde  $\chi$  es el índice espectral. Las guías de ondas con esta función espectral se clasifican en subóhmicas ( $\chi < 1$ ), óhmicas ( $\chi = 1$ ) y superóhmicas ( $\chi > 1$ ). Como se demostrará en las sección (6) existe una asimetría en el comportamiento del sistema respecto a la transición *localización-deslocalización*, que solo ocurre para los regímenes óhmico y subóhmico. En este trabajo se explorarán los 3 tipos de guías de onda cuyas funciones espectrales se recogen en la siguiente relación [14]

$$J(\omega) = \pi\alpha\omega_c^{1-\chi}\omega^\chi, \quad 0 < \omega < \omega_c, \quad (31)$$

donde  $\alpha$  es un parámetro de intensidad de acople.

Así pues, dada la expresión de la función espectral en (30) y la definición en función del acople en (29) se puede obtener una expresión explícita de los acoplamientos a cada modo  $g_k$  y que se recogen en el anexo B.1. Si se define

$$g_k = \sqrt{\frac{\pi\alpha v_g^{\chi+1}\omega_c^{1-\chi}}{2N}} |k|^{\chi/2} \quad (32)$$

Esta es la versión explícita que impondremos en el acoplamiento del espín a cada modo del campo bosónico. En las siguientes secciones se abordarán los métodos numéricos que nos permitirán realizar los métodos numéricos para simular este modelo de *Espín-Bosón*.

## 4. Transformación de Lanczos

A diferencia de su versión monomodo, el hamiltoniano de espín-bosón multimodo en régimen *USC* no es integrable [16] y requiere un tratamiento teórico distinto. Aunque la fenomenología esté siendo cada vez más accesible por los avances experimentales en este campo [17][5], su resolución teórica necesita de técnicas analíticas [18] y métodos numéricos nuevos que posibiliten su investigación.

Para ello, el tratamiento teórico que se va a llevar a cabo en la descripción del sistema se

basa en la transformación de Lanczos (también llamada transformación de cadena o *star to chain*) [16]. Esta es una transformación unitaria que mapea el campo electromagnético cuyos modos interactúan con el emisor (forma de estrella), a una cadena de osciladores armónicos con acoplamiento de cada cavidad con sus primeros vecinos y el emisor acoplado a la primera cavidad (forma de cadena), lo que es ideal para realizar simulaciones numéricas, y el emisor acoplado a la primera cavidad. Esta transformación se fundamenta en buscar una base en el que el hamiltoniano sea tridiagonal

$$H\mathbf{v}_i = t_{i-1}\mathbf{v}_{i-1} + \varepsilon_i\mathbf{v}_i + t_{i+1}\mathbf{v}_{i+1}, \quad (33)$$

con coeficientes reales  $\varepsilon_i, t_i \in \mathbb{R}$ . El algoritmo de Lanczos [19] es un método iterativo donde se van calculando los sucesivos elementos de la nueva base

$$\mathbf{u}_i = H\mathbf{v}_i - t_{i-1}\mathbf{v}_{i-1} = \varepsilon_i\mathbf{v}_i + t_{i+1}\mathbf{v}_{i+1} \quad (34)$$

al mismo tiempo que se realiza una reortogonalización parcial. De esta forma, los elementos de la base que menos contribuyan, esto es, que su norma sea inferior a un valor  $\epsilon$

$$|\mathbf{u}_i|^2 < \epsilon \quad (35)$$

Además, la transformación de Lanczos exige un primer elemento  $v_0$  arbitrario, por lo que tenemos libertad para escogerlo, lo escogemos de tal forma que el término de interacción en el hamiltoniano quede invariante. Esto se consigue acoplando la materia a la primera cavidad y de esta forma nos aseguramos que todas las interacciones sean a primeros vecinos. Por lo tanto, redefiniéndolo como sigue

$$H_{int} = \sum_k g_k \sigma_x (a_k + a_k^\dagger) = g_0 \sigma_x (b_0 + b_0^\dagger), \quad (36)$$

se necesita que  $g_0 \in \mathbb{R}$  y, dado que los anteriores operadores  $a_k, a_k^\dagger$  eran hermíticos, los nuevos también deben serlo. Por lo tanto, definiendo

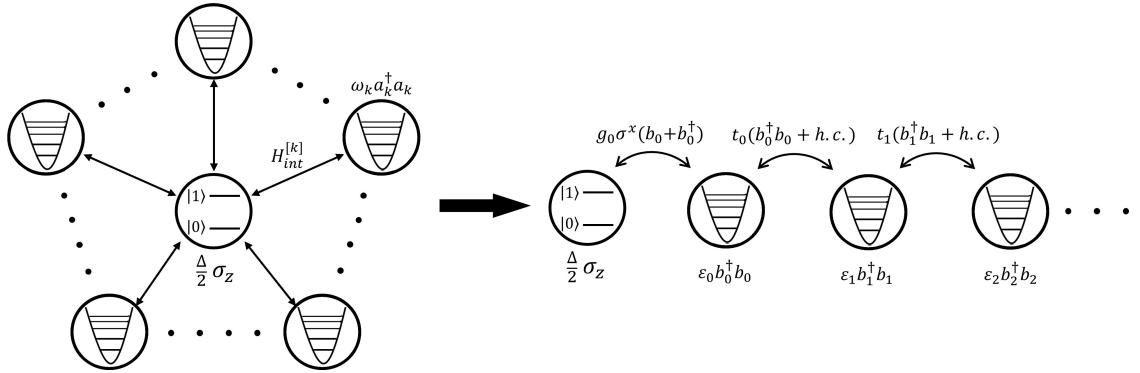
$$g_0 b_0 = \sum_k g_k a_k \quad g_0 b_0^\dagger = \sum_k g_k^* a_k^\dagger, \quad (37)$$

y mediante la relación de commutación

$$\left[ g_0 b_0, g_0 b_0^\dagger \right] = \left[ \sum_k g_k a_k, \sum_{k'} g_{k'}^* a_{k'}^\dagger \right] = \sum_{kk'} g_k g_{k'}^* \left[ a_k, a_{k'}^\dagger \right] = \sum_k |g_k|^2 = g_0^2 \left[ b_0, b_0^\dagger \right], \quad (38)$$

para que se cumpla la relación de commutación  $\left[ b_0, b_0^\dagger \right] = \mathbb{I}$ , entonces

$$g_0 = \sqrt{\sum_k |g_k|^2} \quad (39)$$



**Figura 4:** Diagrama de la transformación *star-to-chain*. La interacción entre el sistema de dos niveles y los modos del campo electromagnético (izquierda) que se describe en el hamiltoniano *Spin-Bosón* se reduce ,tras la transformación de Lanczos, a interacciones a primeros vecinos en el campo magnético con el sistema de dos niveles acoplado al primer sitio.

Una vez obtenido  $\mathbf{u}_0$ , se calculan el resto de vectores  $\mathbf{u}_i$ . Como resultado de este cambio de base el término del hamiltoniano correspondiente al campo queda como

$$H_{EM} = \sum_i \varepsilon_i b_i^\dagger b_i + t_i (b_i^\dagger b_{i+1} + b_i b_{i+1}^\dagger) \quad (40)$$

De esta forma, uno puede transitar de un marco en el que se tiene un sistema de dos niveles acoplado a todos los modos de un espectro de frecuencias a un modelo de tipo *tight-binding* de cavidades acopladas donde el primer sitio interacciona con el emisor (Figura 4) . Finalmente llegamos a la expresión del hamiltoniano transformado

$$H = \frac{\Delta}{2} \sigma_z + g_0 \sigma_x (b_0 + b_0^\dagger) + \sum_i \varepsilon_i b_i^\dagger b_i + t_i (b_i^\dagger b_{i+1} + b_i b_{i+1}^\dagger) . \quad (41)$$

## 5. Matrix Product States

Los *Matrix Product States* (MPS) [20] son una representación de funciones de onda de sistemas de muchos cuerpos descritas mediante contracciones tensoriales. De esta forma, se pueden describir las amplitudes de probabilidad de un estado global mediante contracciones de tensores que codifican el estado local particular de cada uno de los cuerpos.

Esta herramienta permite simular eficientemente sistemas que de forma tradicional no se podría a nivel computacional, proporcionando ventajas tanto en el almacenamiento requerido para describir los estados, como en la simulación y evolución de dichos sistemas [21].

Aunque también tienen aplicabilidad a estados clásicos[22][23], son de gran utilidad y cobraron fama a la hora de describir y caracterizar sistemas cuánticos, donde la dimensión del espacio de Hilbert crece exponencialmente con el tamaño del sistema y existe correlación (entrelazamiento) entre los cuerpos [21]. En concreto, son muy eficientes describiendo espectros de baja

energía de sistemas unidimensionales con hamiltonianos que tienen un gap energético. En estos casos, los estados base siguen la *Ley del Área* [24]. Esta ley establece que la entropía de entrelazamiento (entropía de Von-Neumann) a lo largo de una sistema con gap de energía está acotada por una constante que es independiente del número de partículas del sistema, por lo que la entropía de entrelazamiento entre dos subsistemas escala con el área de la superficie que separa las dos regiones del sistema, y no con el volumen de estas regiones. Este ‘área’ en el caso de una dimensión es simplemente un punto, por lo que la entropía de entrelazamiento para una región de la cadena no crece más allá de un valor constante. Es decir, la entropía es independiente de la longitud total del sistema y depende sólo del tamaño de la frontera.

### 5.1. Descomposición MPS y SVD

Una forma de descomponer una función de onda genérica en representación *MPS* se consigue aplicando reiteradamente operaciones de reorganización de los elementos del tensor y descomposiciones en valores singulares (*SVD*) [25] de una función de onda genérica  $|\psi\rangle$ . Una descomposición en valores singulares de una matriz rectangular  $W_{nm}$  de dimensión  $N \times M$  es una factorización que toma la siguiente forma:

$$W_{nm} = \sum_a U_{na} S_{aa} V_{am}^\dagger \quad , \quad (42)$$

con  $S$  matriz diagonal que contiene los valores singulares ordenados de mayor a menor, y  $U$  y  $V$  matrices de vectores ortonormales asociados a los valores singulares. De esta descomposición se pueden extraer propiedades interesantes de las matrices que la forman, y determinan las posibles formas canónicas de un *MPS*. Si  $N < M$ , entonces  $U$  es matriz cuadrada ( $N \times N$ ) y unitaria  $U^\dagger U = UU^\dagger = \mathcal{I}$ ,  $S$  es cuadrada ( $N \times N$ ) y diagonal y,  $V^\dagger$  es matriz rectangular ( $N \times M$ ) y hermítica  $V^\dagger V = \mathcal{I}$ . En cambio, si  $N > M$  en este caso  $U$  es matriz rectangular ( $N \times M$ ),  $S$  es cuadrada ( $M \times M$ ) y diagonal, y  $U$  es matriz cuadrada ( $N \times N$ ) y unitaria  $V^\dagger V = VV^\dagger = \mathcal{I}$ .

Por lo tanto, sea un sistema de  $L$  cuerpos con dimensión local  $d$ , la función de onda genérica  $\psi$  que describe el sistema la podemos expresar como:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \mathcal{C}_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad , \quad (43)$$

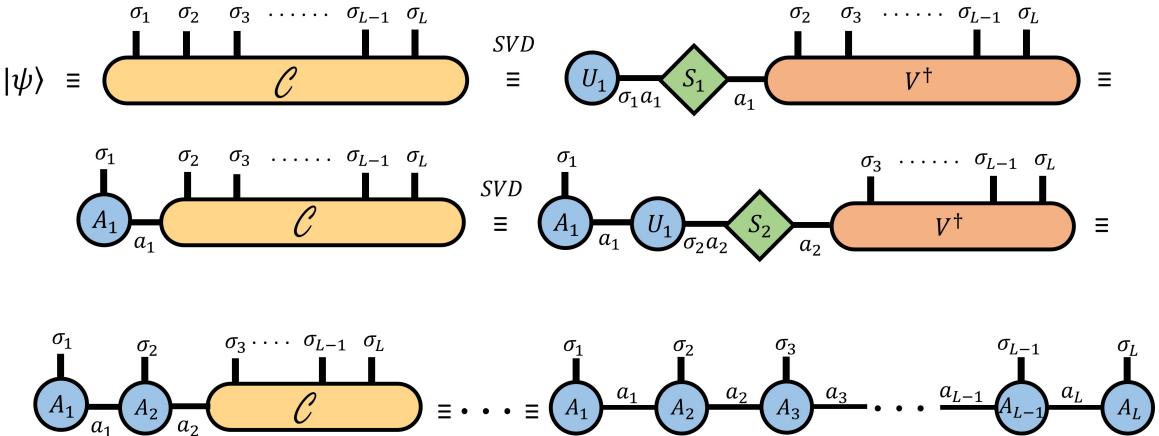
donde a  $\sigma_i = 1, \dots, d$  denominaremos como índices físicos, son los posibles estados locales del cuerpo  $i$ , y  $\mathcal{C}_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$  es el tensor con  $d^L$  componentes con las amplitudes de probabilidad de cada estado global del sistema.

El procedimiento de descomposición en *MPS* es el que sigue [25]. En primera instancia, se toma el tensor  $\mathcal{C}_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$  y se reorganiza separando el primero de los sitios, obteniendo una matriz rectangular  $\mathcal{C}_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}$ . A esta matriz se aplica *SVD*, obteniendo los tensores  $U_{\sigma_1 a_1}$ ,  $S_{a_1 a_1}$  y  $V_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}^\dagger$  de la ecuación (42). Ahora, definimos el tensor  $A_{1, a_1}^{\sigma_1} = U_{\sigma_1 a_1}$  como la reindexación

de los elementos del tensor  $U$  y, se contrae  $S_{a_1 a_1}$  con  $V_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}^\dagger$  obteniendo de nuevo una matriz  $\mathcal{C}_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}$  semejante a la inicial, pero con la información de los  $L - 1$  sitios restantes. Haciendo esto de forma iterada obtenemos la función de onda en formalismo *MPS* que se representa diagramáticamente en la Figura 5 en notación de Penrose [26]

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \mathcal{C}_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_1} U_{\sigma_1 a_1} S_{a_1 a_1} V_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}^\dagger |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle = \\
&= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_1} A_{1, a_1}^{\sigma_1} \mathcal{C}_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_1 a_2} A_{1, a_1}^{\sigma_1} \left( U_{a_1, (\sigma_2, a_2)} S_{a_2 a_2} V_{a_2, (\sigma_3, \dots, \sigma_L)}^\dagger \right) |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle = \\
&= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_1 a_2} A_{1, a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \mathcal{C}_{a_2, (\sigma_3, \dots, \sigma_L)} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle = \dots \\
|\psi\rangle &= \sum_{a_1, \dots, a_L} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A_{1, a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \dots A_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} A_{a_{L-1}, 1}^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (44)
\end{aligned}$$

Ahora, siguiendo el razonamiento de (42), tenemos que  $N < M$  en la *SVD* por lo que las sucesivas matrices  $A$  son unitarias y forman conjuntos ortonormales, al menos en la mitad izquierda de la cadena. En este caso se dice que el *MPS* esta en la forma canónica a izquierdas o *left-canonical*, cumpliéndose que  $AA^\dagger = \mathbb{I}$  en toda la cadena.



**Figura 5:** Procedimiento iterativo de descomposición de un tensor  $\mathcal{C}$  que describe la función de onda global en *MPS*.

Por otro lado, no existe ninguna razón que nos impida comenzar la descomposición por la derecha. En primera instancia se pueden reorganizar los índices del vector  $\mathcal{C}$  de forma que estemos en el caso  $N > M$ , esto es,  $\mathcal{C}_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}), \sigma_L}$ . Procediendo de la misma forma que en (44) se obtiene el *MPS* en su forma *right-canonical*

$$|\psi\rangle = \sum_{a_1, \dots, a_L} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} B_{1, a_1}^{\sigma_1} B_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \dots B_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} B_{a_{L-1}, 1}^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle, \quad (45)$$

donde  $B_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} = V_{(a_{i-1}, \sigma_i), a_i}^\dagger$  son reorganizaciones de los sucesivos tensores  $V^\dagger$ . En este caso, los

tensores  $B$  son unitarios y forman conjuntos ortonormales en la mitad derecha de la cadena y, se cumple  $B^\dagger B = \mathbb{I}$  en toda la cadena.

Existe también la opción de comenzar la descomposición por la izquierda como en la *left-canonical* hasta un sitio  $l$  arbitrario y volver a hacer lo mismo empezando por la derecha como en la *left-canonical* hasta el sitio  $l+1$ . De esta forma, tendremos un espacio bipartido con tensores  $A^{\sigma_i}$  a la izquierda y tensores  $B^{\sigma_i}$  a la derecha, formando entre sí un conjunto ortonormal. A esta forma canónica se la denomina *mixed-canonical*

$$|\psi\rangle = \sum_{a_1, \dots, a_L} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A_{1, a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \dots A_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l} S_{a_l, a_l} B_{a_l, a_{l+1}}^{\sigma_{l+1}} \dots B_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} B_{a_{L-1}, 1}^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle, \quad (46)$$

la cual contiene los valores singulares del sitio  $l$ . El punto más importante de esta forma canónica es que nos permite escribir el MPS completo como una *descomposición de Schmidt*. Contrayendo los índices **a** y llamando

$$|a_l\rangle_A = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_l} |\sigma_1, \dots, \sigma_l\rangle \quad |a_l\rangle_B = \sum_{\sigma_{l+1}, \dots, \sigma_L} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L} |\sigma_{l+1}, \dots, \sigma_L\rangle \quad (47)$$

a los vectores ortonormales a izquierda y derecha respectivamente, el *MPS* toma la forma de una *descomposición de Schmidt* ( $S_{a_l a_l} = s_{a_l}$ )

$$|\psi\rangle = \sum_{a_l} s_{a_l} |a_l\rangle_A |a_l\rangle_B, \quad (48)$$

donde  $s_{a_l} \geq 0$  se denominan valores de Schmidt. Estos valores cuantifican la distribución de probabilidades de las bases ortonormales  $|a_l\rangle_A$  y  $|a_l\rangle_B$  y cuantifican la entropía de entrelazamiento entre los subsistemas *A* y *B* a través de la entropía de *Von-Neumann*

$$S(\rho_A) = - \sum_{a_l} s_{a_l} \log(s_{a_l}), \quad (49)$$

con  $\rho_A = \text{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|)$  siendo la matriz densidad reducida obtenida mediante la traza parcial del estado global sobre el subsistema *B*.

Aunque estas tres formas canónicas son las formas más importantes de escribir un MPS, es muy importante resaltar que su representación no es única. En general, existe un grado de libertad gauge que se puede aprovechar para obtener ventajas dependiendo de lo que se esté representando. Si consideramos dos matrices adyacentes  $M_i^\sigma M_{i+1}^\sigma$  que no están en ninguna forma canónica, siempre se puede hacer un cambio como

$$M_i^\sigma \longrightarrow M_i^\sigma X \quad M_{i+1}^\sigma \longrightarrow X^{-1} M_{i+1}^\sigma \quad (50)$$

Por otro lado, para obtener la forma de *MPS*, se han introducido un conjunto de índices virtuales o auxiliares **a** (*bond indices*) cuya dimensión es máxima para una representación exacta de la función de onda global.

Es en estos índices donde se codifica el entrelazamiento entre los cuerpos (49). En sistemas cuyas interacciones den lugar a estados poco entrelazados, el entrelazamiento de un punto del sistema decae exponencialmente con la distancia (ley de área) por lo que la entropía se hace constante y uno es capaz de truncar. Al truncar, se eliminan aquellos vectores que menos contribuyen a la descripción del sistema, obteniendo un *MPS* aproximado y reduciendo la cantidad de información necesaria para almacenarlo. En estos sistemas, los *MPS* han demostrado ser una herramienta potente para su descripción y simulación. Incluso en sistemas críticos como el que se aborda en este trabajo, se ha demostrado [27][21] que la entropía de entrelazamiento crece lentamente  $S(L) \sim \log(L)$  y los *MPS* siguen funcionando bien.

Sin embargo, esto no es así para la mayoría de casos. En sistemas altamente entrelazados, las correlaciones entre cuerpos son de largo alcance y la entropía de entrelazamiento sigue la *Ley del Volumen*. Para estos sistemas la descripción mediante *MPS* deja de ser correcta, por lo que es necesario acudir a otros formalismos como los *Multi-scale Entanglement Renormalization Ansatz (MERA)* [28], útiles en la descripción de sistemas críticos altamente entrelazados y física de altas energías.

## 5.2. Observables con MPS

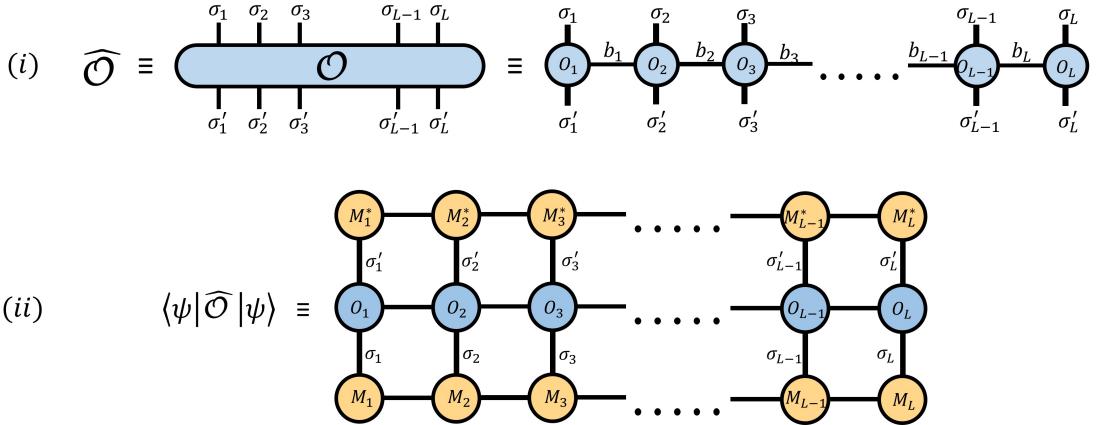
La descomposición por *SVD* de un estado que describe un sistema de muchos cuerpos también se puede aplicar a un operador  $\hat{O}$  que actúe sobre él, dando como resultado un análogo de los *MPS* en el espacio de los operadores denominados *Matrix Product Operators (MPO)* (Figura 6 (ii)). En este caso para describirlos se necesitan tanto índices entrantes ( $\sigma_i$ ) como salientes ( $\sigma'_i$ ).

$$\hat{O} = \sum_{b_1, \dots, b_L} \sum_{\sigma \sigma'} O_{1, b_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} O_{b_1, b_2}^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots O_{b_{L-1}, b_L}^{\sigma_{L-1} \sigma'_{L-1}} O_{b_L, 1}^{\sigma_L} |\sigma\rangle \langle \sigma'|, \quad (51)$$

donde  $|\sigma\rangle = |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle$ . La aplicación del *MPO* de (51) a un *MPS* que, por generalizar vamos a considerar que no esté en forma canónica, da como resultado un nuevo *MPS*.

$$\begin{aligned} \hat{O}|\psi\rangle &= \sum_{\sigma \sigma'} \sum_{a, b} \left( O_{1, b_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} O_{b_1, b_2}^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots \right) \left( M_{1, a_1}^{\sigma'_1} M_{a_1, a_2}^{\sigma'_2} \dots \right) |\sigma\rangle \\ &= \sum_{\sigma \sigma'} \sum_{a, b} \left( O_{1, b_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} M_{1, a_1}^{\sigma'_1} \right) \left( O_{b_1, b_2}^{\sigma_2 \sigma'_2} M_{a_1, a_2}^{\sigma'_2} \right) \dots |\sigma\rangle \\ &= \sum_{\sigma} \sum_{a, b} N_{(1, 1), (a_1 b_1)}^{\sigma_1} N_{(a_1 b_1), (a_2 b_2)}^{\sigma_2} \dots |\sigma\rangle = \sum_{\sigma} \sum_{c} N_{1, c_1}^{\sigma_1} N_{c_1, c_2}^{\sigma_2} \dots |\sigma\rangle \end{aligned} \quad (52)$$

Operación que se puede resumir en  $\hat{O}|\psi\rangle = |\phi\rangle$ , con  $|\phi\rangle$  el nuevo *MPS* construido con matrices  $N^{\sigma_i}$ . La ventaja de trabajar con *MPO*'s es que dejan la forma del *MPS* invariante, al precio de incrementar la *bond dimension*,  $\dim(c_i) = \dim(a_i) \cdot \dim(b_i)$ . Esto no es así para operadores que actúan localmente dado que para estos operadores  $\dim(b_i) = 1$ . En cambio, en el caso de operadores globales que actúan en múltiples sitios, sería necesario aumentar la *bond dimension* para mantener la fidelidad de la descripción del estado. En este caso, si se aplican operadores



**Figura 6:** (i) Representación del operador  $\hat{O}$  como *MPO* y (ii) Diagrama del valor esperado de  $\hat{O}$  como contracción de un *MPO* con dos *MPS*.

no locales repetidamente sin tomar medidas, se corre el riesgo de que la *bond dimension* crezca indefinidamente. Por ello, se suele hacer una SVD al vector resultante para poder truncar, reduciendo la dimensión y que su representación siga siendo eficiente computacionalmente.

Habiendo actuado el operador  $\hat{O}$  sobre  $|\psi\rangle$  es inmediato obtener el valor esperado del operador  $\hat{O}$ . Dado que  $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$ , entonces

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \sum_{\sigma} \sum_{a,c} \left( M_{1,a_1}^{\sigma_1} \dots M_{a_{L-1},1}^{\sigma_L} \right)^{\dagger} \left( N_{1,c_1}^{\sigma_1} \dots N_{a_{L-1},1}^{\sigma_L} \right) \\ &= \sum_{a,c} \sum_{\sigma_L} M_{a_{L-1},1}^{\sigma_L \dagger} \left( \dots \left( \sum_{\sigma_1} M_{1,a_1}^{\sigma_1 \dagger} N_{1,c_1}^{\sigma_1} \right) \dots \right) N_{a_{L-1},1}^{\sigma_L}, \end{aligned} \quad (53)$$

donde se obtiene el valor esperado del operador  $\hat{O}$  contrayendo los tensores.

### 5.3. Hamiltoniano en forma MPO

En lo que atañe a este trabajo el operador principal que actúa globalmente es el hamiltoniano *espín-bosón*. Para hacerlo actuar sobre los tensores del *MPS* se ha de construir una representación explícita del hamiltoniano en forma de *MPO*. Para este propósito, recuperaremos la construcción de un *MPO* y combinemos cada bloque  $O_{bb}^{\sigma\sigma}$  con su proyector correspondiente  $|\sigma\rangle\langle\sigma|$ . Esto es

$$\hat{O} = \sum_{b_1, \dots, b_L} \left( \sum_{\sigma_1 \sigma'_1} O_{1,b_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} |\sigma_1\rangle\langle\sigma'_1| \dots \sum_{\sigma_L \sigma'_L} O_{b_{L-1},1}^{\sigma_L} |\sigma_L\rangle\langle\sigma'_L| \right) = \sum_{b_1, \dots, b_L} \tilde{O}_{1,b_1}^{[1]} \tilde{O}_{b_1,b_2}^{[2]} \dots \tilde{O}_{b_{L-1},1}^{[L]}, \quad (54)$$

de forma que se tenga una cadena de operadores  $\tilde{O}$  en forma matricial que actúen cada uno en un subespacio diferente.

Extrapolando esto al caso del hamiltoniano de la ecuación (41), nos proponemos expresar dicho

hamiltoniano en la forma dada en (54). En este se pueden diferenciar términos locales y términos no locales. Entre estos últimos el acoplamiento del sistema de dos niveles a la primera cavidad y los términos de acople entre las cavidades descritos por un modelo *tight-binding* a primeros vecinos. La estructura del hamiltoniano para las cavidades se repite, por lo que los tensores para sendos subsistemas los podemos construir como

$$H_s = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\Delta}{2}\sigma_z & g_0\sigma_x & g_0\sigma_x & \mathbb{I} \end{pmatrix} \quad H_i = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 & 0 & 0 \\ b_i & 0 & 0 & 0 \\ b_i^\dagger & 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon_i b_i^\dagger b_i & t_i b_i^\dagger & t_i b_i & \mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad (55)$$

donde  $H_s$  y  $H_i$  son los tensores correspondientes al sitio del espín y a la  $i$ -ésima cavidad. El hamiltoniano completo en forma de *MPO* se puede escribir como

$$H_{MPO} = \mathbf{v}_I \mathcal{H}_s \left( \prod_{i=0} \mathcal{H}_i \right) \mathbf{v}_R, \quad (56)$$

donde se han introducido unos vectores triviales  $\mathbf{v}_I = (0 \ 0 \ 0 \ \mathbb{I})$  y  $\mathbf{v}_R = (\mathbb{I} \ 0 \ 0 \ 0)$  para asegurar que el resultado sea (41).

#### 5.4. Estados fundamentales con DMRG

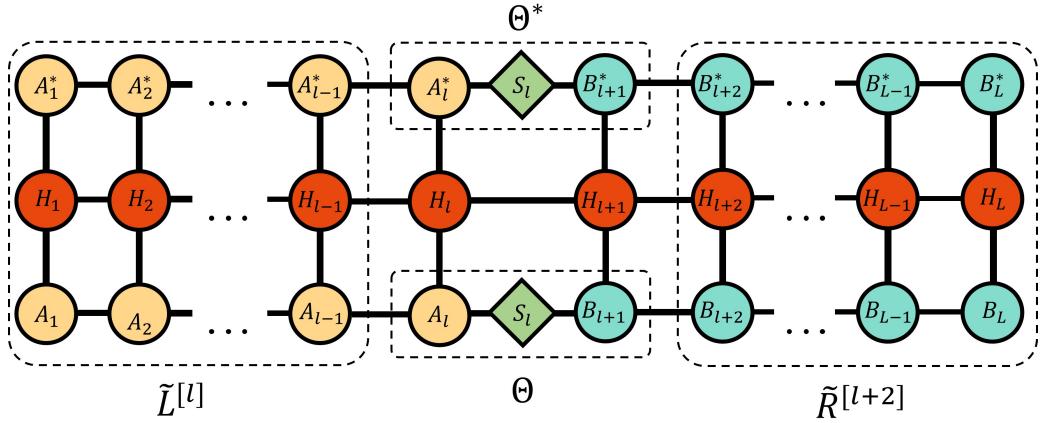
El objetivo que tiene este estudio es observar los estados de mínima energía en sistemas en régimen *USC*. Por ello, estamos interesados en poder calcular la energía mínima de estos sistemas  $E_{gr} = \langle \psi_{gr} | H | \psi_{gr} \rangle$ . En este apartado nos centraremos en describir el algoritmo más eficiente para hallar estados fundamentales de sistemas cuánticos unidimensionales modelados con *MPS*, este es el *Density Matrix Renormalization Group (DMRG)* [29].

El *DMRG* es un algoritmo variacional para hallar el estado fundamental global de un sistema mediante optimizaciones variacionales de los tensores que conforman el *MPS*. En la versión del algoritmo que se va a describir, el objetivo es optimizar una función de onda  $|\psi\rangle$  en su forma *MPS*. Escrita en forma canónica mixta (46), se optimizan a la vez los tensores  $A^{[l]}$ ,  $S^{[l]}$  y  $B^{[l+1]}$  que delimitan las dos regiones (*two-site*) [30] [25].

En dicha optimización, el objetivo es encontrar unos nuevos tensores  $\tilde{A}^{[l]}$ ,  $\tilde{S}^{[l]}$  y  $\tilde{B}^{[l+1]}$  optimizados manteniendo el resto de la cadena fija. Para ello, se contraen estos tensores para dar lugar al tensor  $\Theta_{a_l, a_{l+2}}^{\sigma_l \sigma_{l+1}}$ . A continuación, se contraen parcialmente todos los tensores a izquierda y a derecha dando lugar a  $\tilde{L}^{[l]}$  y  $\tilde{R}^{[l+2]}$ , respectivamente. Estos tensores constituyen una base ortonormal junto a los dos sitios que se optimizan  $\{|\tilde{L}^{[l]}\rangle \otimes |\sigma_l\rangle \otimes |\sigma_{l+1}\rangle \otimes |\tilde{R}^{[l+2]}\rangle\}$ , la cual conforma la función de onda en el espacio variacional que se ha de optimizar

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\sigma_l, \sigma_{l+1}, a_l, a_{l+1}} \Theta_{a_l, a_{l+2}}^{\sigma_l \sigma_{l+1}} |\tilde{L}^{[l]} \sigma_l \sigma_{l+1} \tilde{R}^{[l+2]}\rangle. \quad (57)$$

Dados los tensores  $\tilde{L}^{[l]}$  y  $\tilde{R}^{[l+2]}$ , su contracción con los tensores  $H^{[l]}$  y  $H^{[l+1]}$  (Figura 8(a)) constituyen el hamiltoniano proyectado sobre el espacio variacional  $H_{eff}$ . Por lo tanto, estaremos



**Figura 7:** Representación de la energía como contracción del valor esperado del hamiltoniano en forma de *MPO* con la función de onda en forma *MPS mixed canonical*. Las líneas discontinuas representan la agrupación de tensores en el primer paso del *DMRG* que optimiza los sitios  $l$  y  $l + 1$ .

interesados en minimizar la energía dada por

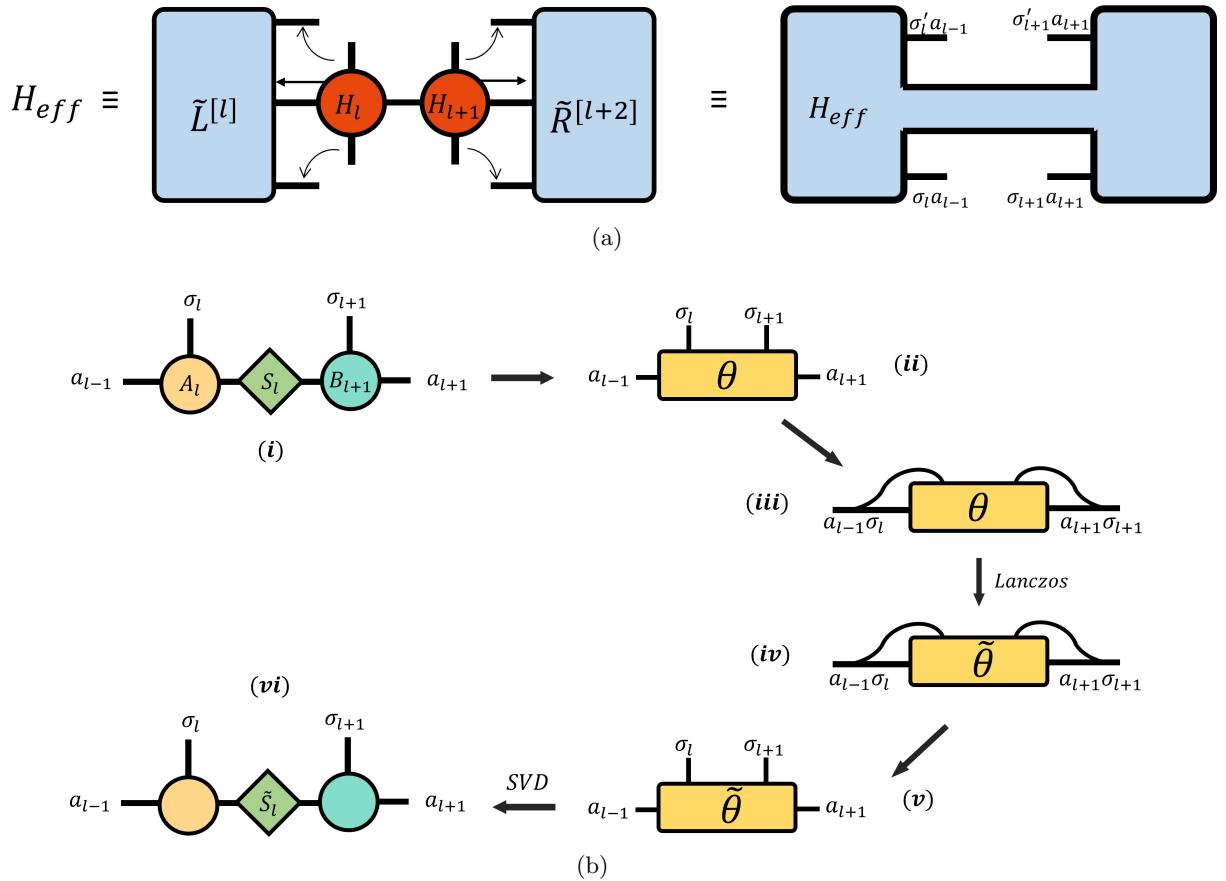
$$E = \langle \tilde{\psi} | H_{eff} | \tilde{\psi} \rangle \quad (58)$$

Reagrupando los índices físicos con los índices *bond* de cada sitio se puede ver a  $H_{eff}$  como una matriz de dimensiones  $D^2 d^2 \times D^2 d^2$ . Por lo tanto, minimizar la energía significa encontrar el estado fundamental de dos sitios  $\tilde{\Theta}_{a_l, a_{l+2}}^{\sigma_l \sigma_{l+1}}$  de dimensión  $D^2 d^2$  del hamiltoniano efectivo.

Para esta tarea, suele utilizarse un algoritmo iterativo como *Lanczos* o *conjugate gradient* en lugar de una diagonalización exacta, dado que optimizar completamente de forma local podría dificultar hallar el mínimo global. Tras este paso, se vuelven a separar los índices físicos de los *bond* y se hace *SVD* obteniendo los tensores  $\tilde{A}^{[l]}$ ,  $\tilde{S}^{[l]}$  y  $\tilde{B}^{[l+1]}$  optimizados.

En el siguiente paso, el tensor  $\tilde{B}^{[l+1]}$  se transforma a *left-canonical* y se repite el proceso avanzando un sitio en la cadena con los tensores  $\tilde{A}^{[l+1]} \tilde{S}^{[l+1]} B^{l+2}$ , después con  $\tilde{B}_{n+2} A_{n+3} \dots$  etc. En esta versión de *DMRG* se optimizan dos sitios simultáneamente (*two site*), la cual es un buen equilibrio entre velocidad y eficacia. En el caso de tomar mayor cantidad de sitios para optimizar a la vez proporciona mayores garantías de alcanzar el mínimo global, con la contrapartida de que la dimensión de las matrices que hay que diagonalizar aumenta, por lo que es más costoso a nivel computacional. En el otro sentido, se tiene la versión de *DMRG* donde se optimiza solo un sitio en cada paso (*one-site*) que es más rápida, pero no da tantas garantías de llegar al estado fundamental global [31][32].

Una vez se llega al extremo derecho de la cadena se hace otro recorrido hasta el extremo izquierdo, y hasta la posición de partida. A todo este proceso se le denomina *sweep*, y tras un número determinado de ellos se espera que el algoritmo converja a un mínimo.



**Figura 8:** (a) Construcción de  $H_{eff}$  a partir de la red tensorial. Los *bond indices* de  $H^{[l]}$  y  $H^{[l+1]}$  se contraen con  $\tilde{L}^{[l]}$  y  $\tilde{R}^{[l+2]}$  y se reorganizan los indices. (b) Procedimiento de optimización de los tensores de los sitios  $l$  y  $l+1$  (i). Los tensores se agrupan (ii) en un tensor de dos sitios  $\Theta$  y se unen los *bond indices* con los índices físicos (iii). Este tensor se optimiza respecto a  $H_{eff}$ , obteniendo  $\tilde{\Theta}$  (iv). Finalmente se vuelven a dividir los indices (v) y se hace *SVD* recuperando los tensores optimizados (vi).

## 6. Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para el estado fundamental de un sistema de dos, tres y cuatro niveles acoplada a un conjunto de modos en régimen *USC*.

El procedimiento que se siguió para simular estos sistemas exigía en primera instancia escoger un número de modos  $N_k$  comprendidos en el intervalo  $[-\omega_c/v_g, \omega_c/v_g]$  que definen el grado de discretitud del modelo y para los cuales calcular el acoplamiento del átomo a cada modo ( $g_k$ ) (32). Un acoplamiento descrito de esa forma proporciona un hamiltoniano difícil de tratar y es necesario realizar una transformación de Lanczos pasando a una base en la que el hamiltoniano es tridiagonal. De esta forma logramos describir el campo mediante un modelo de *tight-binding* con osciladores acoplados a primeros vecinos, al mismo tiempo que se reduce la dimensión a  $N_{map}$  gracias a que el algoritmo de Lanczos elimina las bases ortogonales que menos contribuyen ( $N_{map} < N_k$ ).

Para aplicar el algoritmo de DMRG y obtener el estado base del sistema se utilizo la librería TeNPy de python [30]. Al aplicar la transformación de Lanczos al modelo espín-bosón discretizado, el modelo de primeros vecinos resultante es idóneo para su implementación utilizando MPS

A la hora de realizar las simulaciones se tuvo que tener en cuenta varios aspectos. Conforme se aumenta el acople, los efectos de los términos contrarrotantes aumentan en el sistema. Esto se traduce en que el estado base tiene mayor población de bosones en los sitios del *tight-binding*, necesitando incrementar la dimensión ( $N_{ph}$ ) de los tensores locales.

Por otro lado, siguiendo el mismo razonamiento, las sucesivas operaciones no locales sobre los *MPS* incrementan la *bond dimension* y, aunque los algoritmos de *SVD* ya contemplan la reducción de la dimensión en su proceso de optimización, puede crecer demasiado. En algunas situaciones como puntos de transición de fase el entrelazamiento en la red es muy grande, proporcionando valores para las *bond dimension* difíciles de manejar, y es necesario poner una cota superior a las dimensiones de los índices de enlace ( $B_{max}$ ), especialmente durante la ejecución del algoritmo *DMRG*.

Como se mencionó anteriormente, este es el algoritmo que utilizamos para encontrar el estado fundamental. Inicialmente este algoritmo exige un estado inicial  $|\psi_0\rangle$  desde donde comenzar a buscar. Proporcionar un estado inicial aproximado puede ser decisivo en la convergencia del algoritmo, puesto que para sistemas de gran tamaño en transiciones de fase el conjunto de parámetros (o *landscape*) es tan grande y hay tantos mínimos locales que al algoritmo le es imposible encontrar el mínimo global. Para solventar posibles situaciones de este tipo y ser más eficientes, empezaremos con un estado inicial  $|\psi_0\rangle = |\mathbf{0}\rangle$  correspondiente al sistema si excitaciones.

Tras obtener el estado fundamental en forma *MPS* estamos interesados en medir ciertos observables como la energía, la entropía de entrelazamiento,  $S_z$  y  $S_x$ . Para calcular estos valores se pone cada operador en forma de *MPO* y se contrae la red de tensores como en la Figura 6.(ii).

En las siguientes 3 secciones mostraremos los resultados principales obtenidos para sistemas de dos, tres y cuatro niveles, considerando guías de onda en régimen subóhmico, óhmico y superóhmico.

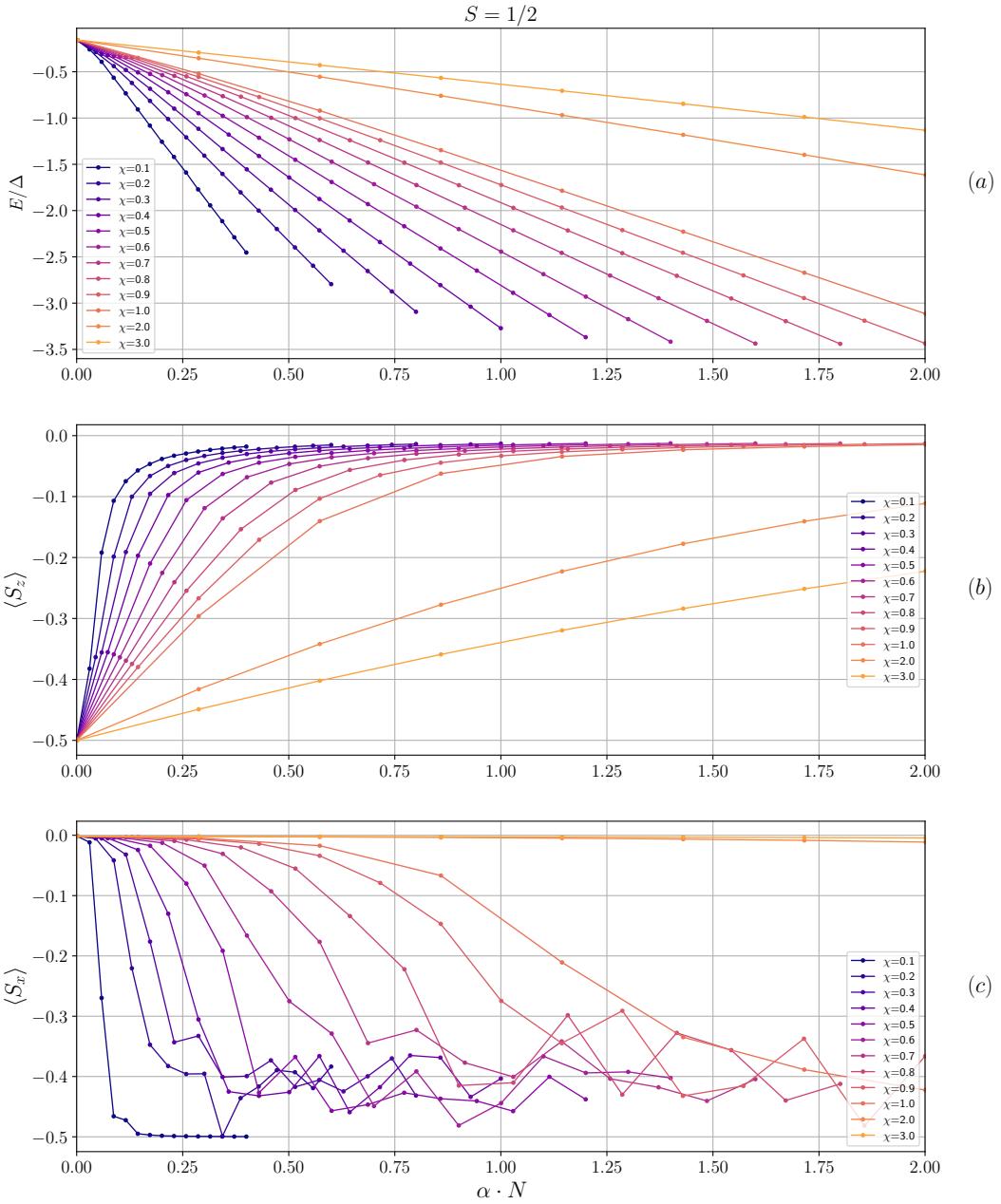
### 6.1. Dos niveles

El modelo *Espín-Bosón* con un sistema de dos niveles ha sido ampliamente estudiado. En esta sección, veremos si somos capaces de reproducir los resultados de la literatura en esta materia mediante el uso de las técnicas teóricas y los métodos numéricos recogidos en los capítulos 4 y 5.

De estudios previos del modelo de *Espín-Bosón* en régimen *USC* [33] se sabe que a acoplamientos débiles, el estado fundamental del sistema de dos niveles viene descrito por los autoestados de  $\sigma_z$ . Estos estados están localizados y  $S_z$  es un buen observable, dado que siempre se podrá localizar el estado en uno de los dos niveles energéticos. Conforme aumenta el acople, los efectos producidos por términos contrarrotantes del hamiltoniano se vuelven cada vez más predominantes,  $S_z$  deja de ser un buen observable y los estados del sistema transicionan a autoestados de  $\sigma_x$ . En esta situación un observable bien definido es  $S_x$  dado que los estados están deslocalizados en  $\sigma_z$ .

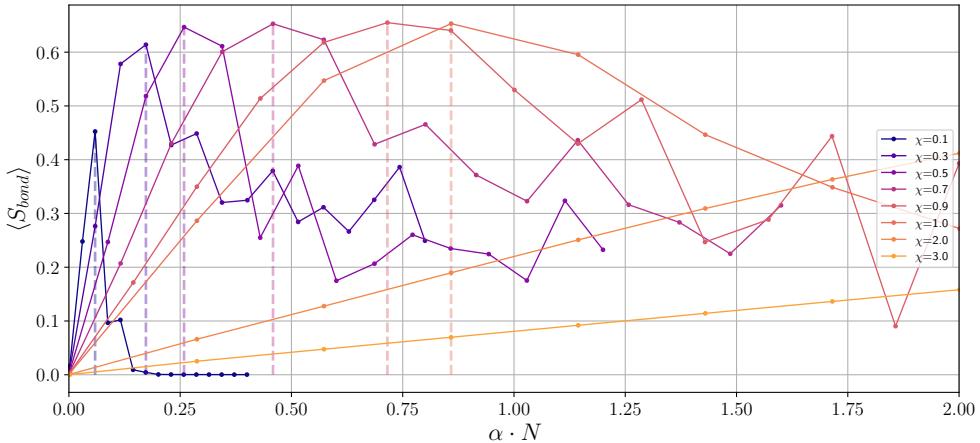
Esto es precisamente lo que encontramos en las simulaciones. Los resultados para la energía y los observables  $S_z$  y  $S_x$  se muestran en las siguientes gráficas para varios exponentes  $\chi$  de la función espectral  $J(\omega)$ . En la Figura 9.a se puede observar como la energía se hace cada vez más pequeña conforme sube el acoplamiento y, además, la pendiente de la curva disminuye medida que aumentamos  $\chi$  y se transiciona de régimen subóhmico a superóhmico. La constante de acoplamiento se le ha añadido un factor de escala  $N = 1, 2, 3$  para dar cuenta del numero de sistemas de dos niveles que integra el sistema principal.

Por otro lado, el valor de  $\langle S_z \rangle$  disminuye conforme aumentamos el acoplamiento al tiempo que aumenta  $\langle S_x \rangle$ . Los resultados de las simulaciones se muestran en la Figura 9.b y 9.c, donde se observa que este comportamiento es más pronunciado para valores pequeños del índice espectral  $\chi$  y se va relajando a medida que aumentamos su valor. Esto es así hasta el régimen óhmico ( $\chi = 1$ ). En régimen superóhmico se observa como al sistema le cuesta cada vez más adaptarse al aumento del acople y permanece prácticamente inalterado. Este hecho se aprecia mayormente en  $\langle S_x \rangle$ , donde no sufre ningún cambio.



**Figura 9:** Observables del estado fundamental en función de la intensidad de acoplamiento  $\alpha \cdot N$  para un sistema de dos niveles, con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$ ,  $B_{max} = 50$ . En orden descendente se muestran (a) la energía y los valores esperados de  $S_z$  (b) y  $S_x$  (c) para un conjunto de valores del índice espectral  $\chi$ .

Además, por estudios anteriores se sabe que este sistema tiene una transición de fase en los regímenes óhmico y subóhmico [34]. Aunque los resultados obtenidos para  $\langle S_z \rangle$  y  $\langle S_x \rangle$  son consistentes con ello, un buen indicador de la existencia de la transición de fase, es la entropía de entrelazamiento. Esta la podemos obtener mediante los valores de *Schmidt* en la ecuación (49). En la Figura 10 se muestran los resultados de la entropía de entrelazamiento entre el sistema de dos niveles y la cavidad a la que esta acoplada a medida que aumentamos el acoplamiento.



**Figura 10:** Entropía del estado fundamental en función de la intensidad de acoplamiento  $\alpha \cdot N$  para un sistema de dos niveles, con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$ ,  $B_{max} = 50$ . Los puntos representan los resultados de las simulaciones para un conjunto de índices espectrales  $\chi$ , mientras las líneas discontinuas marcan el punto de transición de fase.

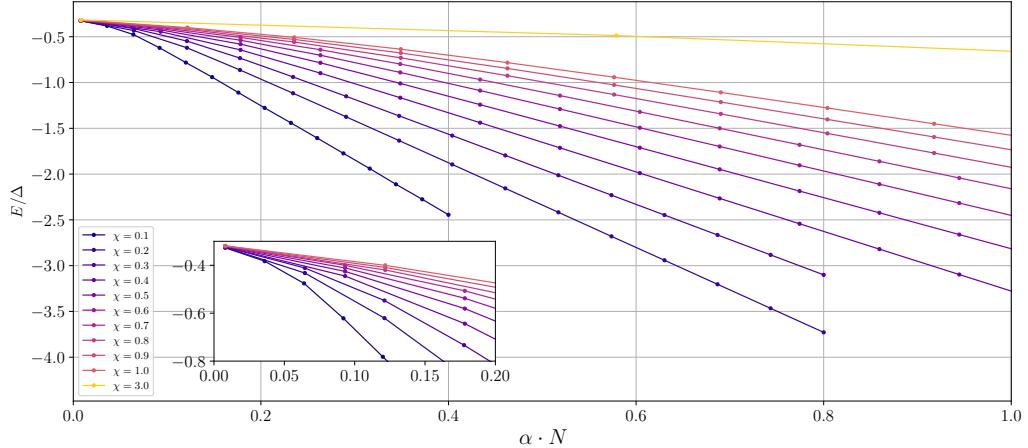
En ella podemos ver como la entropía de entrelazamiento crece hasta alcanzar un máximo, y después desciende. Esta curva es una prueba de la existencia de transición de fase y como se puede ver, el punto crítico se alcanza para acoplamientos mayores conforme aumentamos el índice espectral  $\chi$ . De nuevo, esto solo ocurre para los regímenes óhmico y subóhmico, mientras el régimen superóhmico no parece presentar transición de fase. De esta forma, se han conseguido verificar los resultados que se conocían para este sistema como la existencia de transición de fase del sistema de dos niveles para regímenes óhmico y subóhmico, y observando que el comportamiento en el régimen superóhmico es totalmente distinto.

## 6.2. Tres niveles

Una vez abordados los resultados para un sistema de dos niveles y habiendo verificado la fenomenología surge de este, cabe preguntarse cual sería el comportamiento del sistema para el caso de tener sistemas de más niveles. En este trabajo nos ocuparemos del caso de sistemas de tres y cuatro niveles.

El modelo descrito por el hamiltoniano (25) es fácilmente extensible al caso de átomos con más de dos niveles de energía por simple construcción. Se ha visto que un sistema de dos niveles se puede describir mediante el operador  $S_z = \sigma_z/2$  cuya base de autoestados es  $\{-1/2, 1/2\}$ . Para formar un sistema de tres niveles se pueden agrupar dos sistemas de dos niveles y formar un sistema conjunto, donde el espacio resultante viene dado por el producto tensorial de ambos subespacios  $|s_1\rangle \otimes |s_2\rangle = |-(s_1 + s_2)\rangle, |s_1 + s_2\rangle$ . Resultando una nueva base con estados  $\{|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}$ . Con la misma construcción, a partir de este se puede obtener el sistema conjunto de tres spines que viene dado por  $\{|-3/2\rangle, |-1/2\rangle, |1/2\rangle, |3/2\rangle\}$ . Introduciendo estos cambios, el hamiltoniano (25) sigue siendo válido únicamente cambiando las matrices de Pauli  $\sigma_x, \sigma_z$ , que describen sistemas de espín 1/2, por sus análogos  $S_x, S_z$  que describan sistemas con espín 1 y espín 3/2.

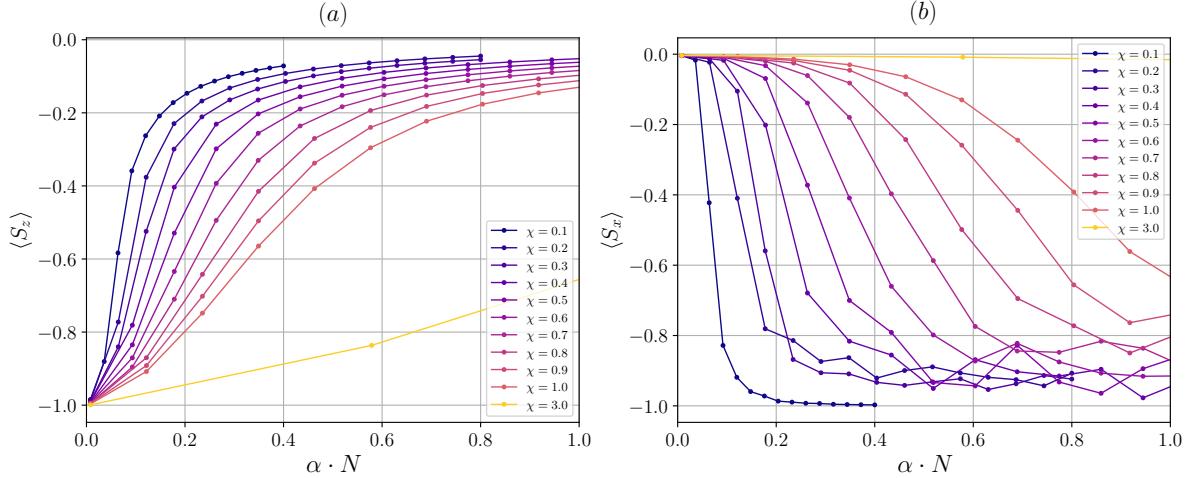
Los resultados obtenidos para la energía mediante las simulaciones se pueden ver en la Figura 11. En ella vemos que la tendencia conforme aumenta el acople es similar al caso de un sistema de dos niveles, esto es, la energía disminuye conforme se aumenta el acople, siendo más pronunciada para valores pequeños de  $\chi$ .



**Figura 11:** Energía del estado fundamental en función de la intensidad de acoplamiento  $\alpha \cdot N$  para un sistema de tres niveles. Los puntos representan los resultados de las simulaciones para un conjunto de valores del índice espectral  $\chi$  con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$  y  $B_{max} = 100$ .

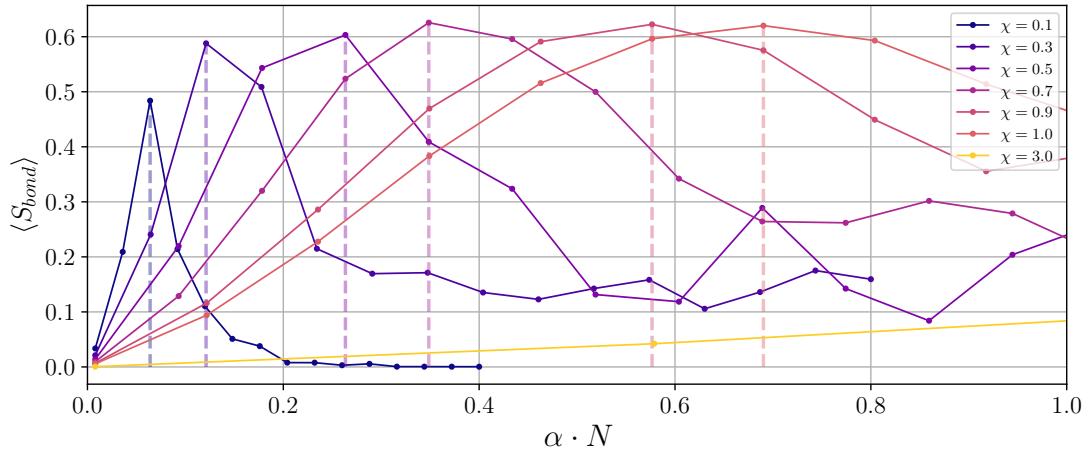
Además, haciendo zoom a acoplamientos pequeños mediante el gráfico interno, se puede atisbar que existe un cambio de tendencia en la energía que puede ser debida a una transición de fase.

Por otro lado, respecto a  $\langle S_z \rangle$  y  $\langle S_x \rangle$  tenemos una situación parecida. Conforme aumenta el acople  $\langle S_z \rangle$  (Figura 12.a) tiende a 0 y  $\langle S_x \rangle$  (Figura 12.b) pasa a predominar en la descripción del sistema para los regímenes óhmico y subóhmico, mientras que para el régimen superóhmico el comportamiento es totalmente contrario y permanece inalterado.



**Figura 12:** Observables  $S_z(a)$  y  $S_x(b)$  del estado fundamental en función de la intensidad de acople  $\alpha \cdot N$  para un sistema de tres niveles. Los puntos representan los resultados de las simulaciones para un conjunto de valores del índice espectral  $\chi$  con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$  y  $B_{max} = 100$ .

En cuanto a la entropía, en la Figura 13 se muestran los resultados obtenidos. Como ocurría en el caso de un sistema de dos niveles, la entropía aumenta conforme aumenta el acoplamiento hasta alcanzar el punto crítico. Este punto crítico que marca la transición de fase aparece a acoplos mayores conforme se aumenta el índice espectral  $\chi$ , y de nuevo, los únicos regímenes presentan transición son los regímenes óhmico y subóhmico.

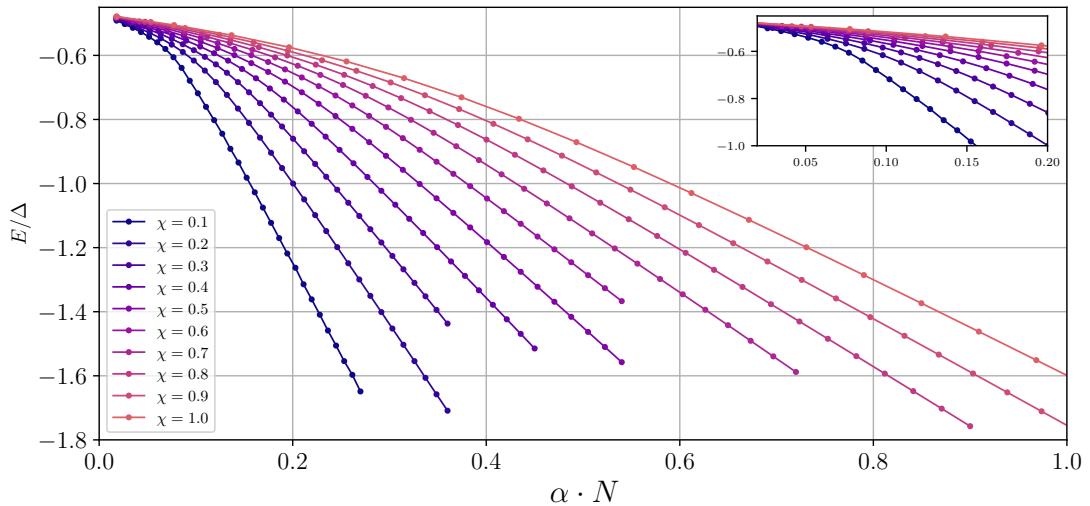


**Figura 13:** Entropía del estado fundamental en función de la intensidad de acoplamiento  $\alpha \cdot N$  para un sistema de tres niveles, con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$ ,  $B_{max} = 100$ . Los puntos representan los resultados de las simulaciones para un conjunto de índices espectrales  $\chi$ , mientras las líneas discontinuas marcan el punto de transición de fase.

### 6.3. Cuatro niveles

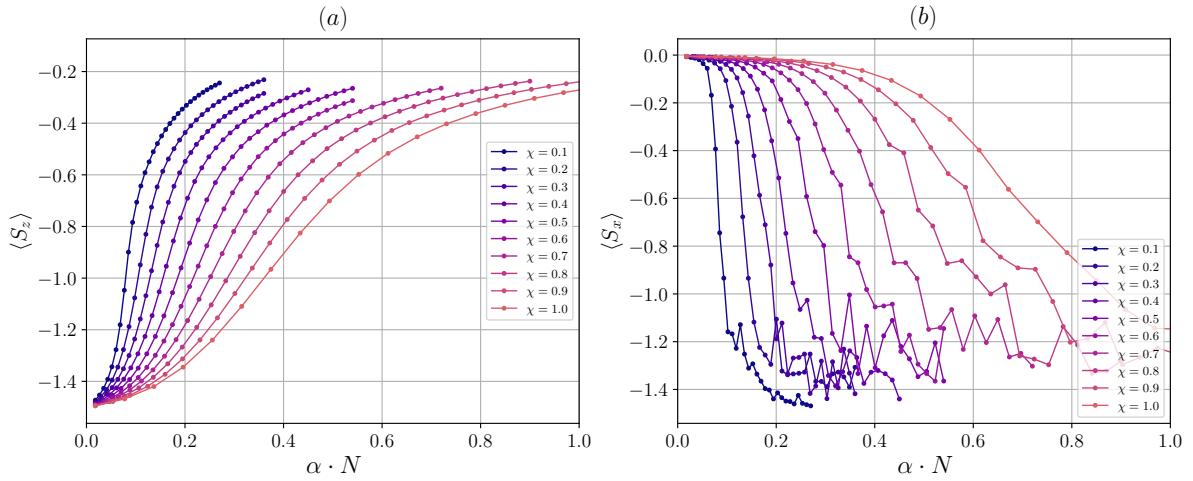
Vistos los resultados para un sistema de 3 niveles, no se han encontrado muchas diferencias en el comportamiento respecto al caso de dos niveles. El sistema de tres niveles se modelizó como un sistema con espín entero ( $S = 1$ ) compuesto por dos sistemas de dos niveles. En esta sección presentamos los resultados del caso para 4 niveles, que simulamos como un espín semientero ( $S = 3/2$ )

Los resultados para la energía se pueden ver en la Figura 14. En este caso, para la energía encontramos un comportamiento similar que en los otros dos casos. La energía disminuye conforme se aumenta el acople, siendo la caída menos pronunciada conforme se transita hacia valores mayores de  $\chi$ . En la gráfica interna, podemos apreciar como la tendencia en la energía cambia antes y después de la transición.



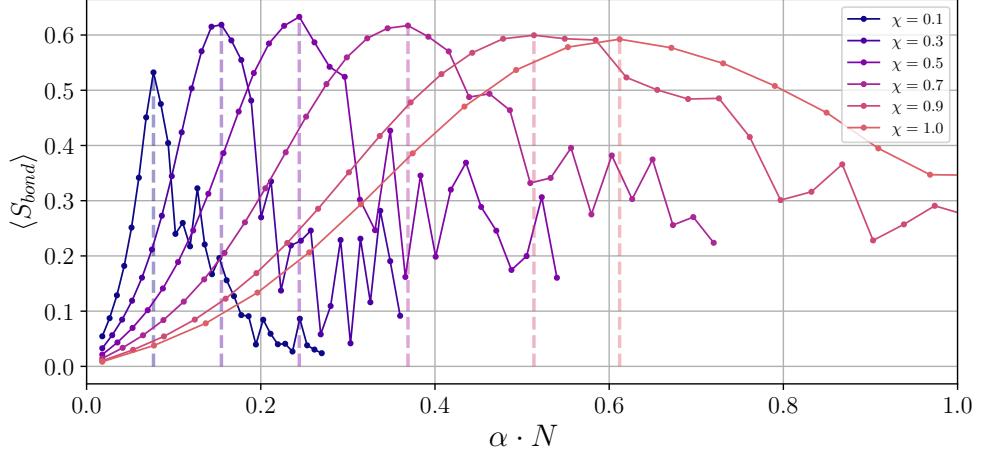
**Figura 14:** Energía del estado fundamental en función de la intensidad de acoplamiento  $\alpha \cdot N$  para un sistema de cuatro niveles, con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$ ,  $B_{max} = 50$ . Los puntos representan los resultados de las simulaciones para un conjunto de índices espectrales  $\chi$ , mientras las líneas discontinuas marcan el punto de transición de fase.

Para los observables, los resultados de la simulación (Figura 15) arrojaron de nuevo valores similares que en los casos de dos y tres niveles. Se observa de nuevo como el sistema pasa de estar descrito por autoestados de  $\sigma_z$  a describirse mediante los de  $\sigma_x$ . Esto es, conforme aumenta el acople, los valores esperados para  $S_z$  tienden a 0 mientras los de  $S_x$  aumentan. Además, se sigue la misma progresión conforme se aumenta el valor del índice espectral, es decir, al sistema cada vez la cuesta más adaptarse al aumento de la intensidad del acople.



**Figura 15:** Observables  $S_z$  (a) y  $S_x$  (b) del estado fundamental en función de la intensidad de acople  $\alpha \cdot N$  para un sistema de cuatro niveles. Los puntos representan los resultados de las simulaciones para un conjunto de valores del índice espectral  $\chi$  con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$  y  $B_{max} = 50$ .

Por último, a raíz de los resultados obtenidos de la entropía (Figura 16), los sistemas siguen presentando puntos críticos para valores parecidos del acoplamiento (reescalado por  $N$ ).

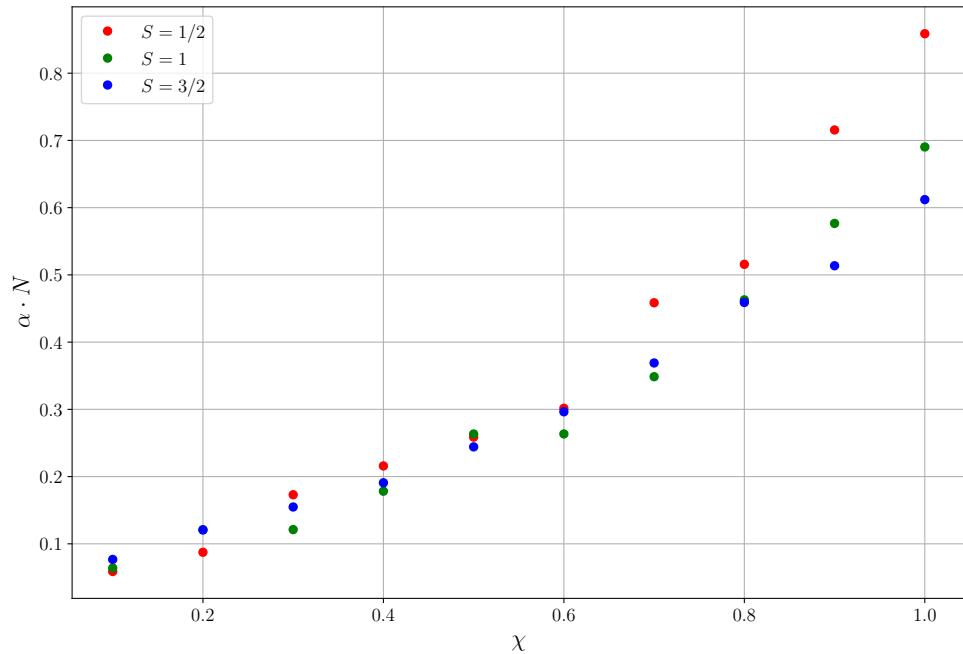


**Figura 16:** Entropía del estado fundamental en función de la intensidad de acoplamiento  $\alpha \cdot N$  para un sistema de cuatro niveles, con  $Nk = 101$ ,  $N_{ph} = 20$ ,  $B_{max} = 50$ . Los puntos representan los resultados de las simulaciones para un conjunto de índices espectrales  $\chi$ , mientras las líneas discontinuas marcan el punto de transición de fase.

Los resultados obtenidos para los sistemas de dos, tres y cuatro niveles han proporcionado resultados similares para la energía, los observables  $S_z$  y  $S_x$  y la entropía. A raíz de esto podemos decir que estos sistemas se comportan de la misma forma en lo que respecta a su interacción con el campo electromagnético y son bajo este prisma, sistemas equivalentes. Además, se puede afirmar que conforme a los resultados obtenidos en otros estudios, el modelo de *Espin-Bosón* en régimen *USC* presenta transiciones de fase para régimen óhmico y subóhmico, no siendo así

para regímenes superóhmicos.

Por último, podemos tomar los valores obtenidos para los puntos críticos encontrados en los sistemas de dos, tres y cuatro niveles y ver si existe alguna relación. Dicha relación se puede ver en la Figura 17, donde se representan el valor del acoplamiento reescalado por el numero de niveles para el cual se a obtenido el punto crítico, frente los diferentes valores del índice espectral  $\chi$  en los que el sistema presentaba transición de fase.



**Figura 17:** Resultados obtenidos para los puntos críticos  $\alpha \cdot N$  en función del índice espectral  $\chi$  para sistemas de dos, tres y cuatro niveles.

Se observa que las transiciones se producen en aproximadamente los mismos puntos. De hecho, las mayores discrepancias se tienen en los valores de  $\chi$  más altos con transiciones de fase a mayores acoplamientos y, por consiguiente, los errores numéricos de estos puntos pueden ser mucho mayores que en acoplamiento bajo.

En cambio, para acoplamientos bajos la concordancia es muy grande, por lo que se puede intuir que la transición de fase encontrada en este modelo *Espín-Bosón* para sistemas de dos, tres y cuatro niveles, no es sino la misma transición de fase.

## 7. Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado un modelo de interacción luz-materia en sistemas de dos, tres y cuatro niveles acoplados a una guía de ondas descrito mediante un modelo de *Espín-Bosón* y en régimen de acople ultra fuerte *USC*.

Se ha obtenido el estado fundamental del sistema utilizando un seguido de técnicas teóricas. Usando la transformación de Lanczos se ha llegado a un Hamiltoniano equivalente con interacciones a primeros vecinos el cuál se ha resuelto usando el método numérico de los *Matrix Product States (MPS)* y el algoritmo *DMRG*.

De esta forma se ha conseguido reproducir resultados conocidos para el sistema de dos niveles y se ha ampliado a situaciones con más niveles. A raíz de esto se han conseguido signos de la transición de fase *localizado-deslocalizado* mediante los observables y el punto crítico para estos sistemas con la entropía de entrelazamiento. En este sentido trazando una relación entre puntos críticos, se ha comprobado la transición de fase en sistemas de dos, tres y cuatro niveles es la misma.

Otro punto importante es el de la guía de ondas, donde se ha logrado reproducir resultados conocidos utilizando varias funciones espectrales. Concretamente se ha verificado que las transiciones de fase se acotan únicamente a las guías de onda óhmicas y subóhmicas.

Como presepectivas futuras se podría ampliar el estudio a sistemas dos niveles interactuantes entre sí ( $N > 1$ ) acoplados al campo electromagnético y ver el papel de dicha interacción en la transición de fase que se ha estudiado aquí.

## 8. Bibliografía

- [1] Alexandra S. Sheremet, Mihail I. Petrov, Ivan V. Iorsh, Alexander V. Poshakinskiy, and Alexander N. Poddubny. Waveguide quantum electrodynamics: collective radiance and photon-photon correlations, 2022.
- [2] H. J. Kimble. The quantum internet. *Nature*, 453(7198):1023–1030, June 2008.
- [3] Anton Frisk Kockum, Adam Miranowicz, Simone De Liberato, Salvatore Savasta, and Franco Nori. Ultrastrong coupling between light and matter. *Nature Reviews Physics*, 1(1):19–40, January 2019.
- [4] I. I. Rabi, J. R. Zacharias, S. Millman, and P. Kusch. A new method of measuring nuclear magnetic moment. *Phys. Rev.*, 53:318–318, Feb 1938.
- [5] P. Forn-Díaz, J. J. García-Ripoll, B. Peropadre, J.-L. Orgiazzi, M. A. Yurtalan, R. Bel'yansky, C. M. Wilson, and A. Lupascu. Ultrastrong coupling of a single artificial atom to an electromagnetic continuum in the nonperturbative regime. *Nature Physics*, 13(1):39–43, October 2016.
- [6] M.E. Peskin and D.V. Schroeder. *An introduction to quantum field theory*. CRC press, 2018.
- [7] Paul Adrien Maurice Dirac. The quantum theory of the electron. *Proc. R. Soc. Lond. A117*. 610–624, 1928.
- [8] *Other Equivalent Formulations of Electrodynamics*, chapter 4, pages 253–359. John Wiley Sons, Ltd, 1997.
- [9] *Lagrangian and Hamiltonian Approach to Electrodynamics, The Standard Lagrangian and the Coulomb Gauge*, chapter 2, pages 79–168. John Wiley Sons, Ltd, 1997.
- [10] P. A. M. Dirac. Gauge-invariant formulation of quantum electrodynamics. *Canadian Journal of Physics*, 33(11):650–660, 1955.
- [11] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics, 2 Volume Set*. Wiley, 1992.
- [12] Lev Davidovich Landau, John Stewart Bell, MJ Kearsley, LP Pitaevskii, EM Lifshitz, and JB Sykes. *Electrodynamics of continuous media*, volume 8. elsevier, 2013.
- [13] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, Matthew P. A. Fisher, Anupam Garg, and W. Zwerger. Dynamics of the dissipative two-state system. *Rev. Mod. Phys.*, 59:1–85, Jan 1987.
- [14] Ulrich Weiss. *Quantum Dissipative Systems*. WORLD SCIENTIFIC, 4th edition, 2012.
- [15] Ying Wu and Xiaoxue Yang. Strong-coupling theory of periodically driven two-level systems. *Phys. Rev. Lett.*, 98:013601, Jan 2007.

- [16] David D. Noachtar, Johannes Knörzer, and Robert H. Jonsson. Nonperturbative treatment of giant atoms using chain transformations. *Physical Review A*, 106(1), July 2022.
- [17] Andrei Vrajitoarea, Ron Belyansky, Rex Lundgren, Seth Whitsitt, Alexey V. Gorshkov, and Andrew A. Houck. Ultrastrong light-matter interaction in a multimode photonic crystal. *arXiv*, 9 2022.
- [18] José D. Guimaraes, Mikhail I. Vasilevskiy, and Luís S. Barbosa. Digital quantum simulation of non-perturbative dynamics of open systems with orthogonal polynomials. *Quantum*, 8:1242, February 2024.
- [19] Cornelius Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Res. Natl. Bur. Stand. B*, 45:255–282, 1950.
- [20] F. Verstraete, V. Murg, and J.I. Cirac. Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems. *Advances in Physics*, 57(2):143–224, March 2008.
- [21] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev. Entanglement in quantum critical phenomena. *Phys. Rev. Lett.*, 90:227902, Jun 2003.
- [22] T. H. Johnson, S. R. Clark, and D. Jaksch. Dynamical simulations of classical stochastic systems using matrix product states. *Physical Review E*, 82(3), September 2010.
- [23] Jonas Haferkamp, Christian Bertoni, Ingo Roth, and Jens Eisert. Emergent statistical mechanics from properties of disordered random matrix product states. *PRX Quantum*, 2(4), October 2021.
- [24] M B Hastings. An area law for one-dimensional quantum systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2007(08):P08024–P08024, August 2007.
- [25] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326(1):96–192, January 2011.
- [26] Roger Penrose et al. Applications of negative dimensional tensors. *Combinatorial mathematics and its applications*, 1:221–244, 1971.
- [27] Pasquale Calabrese and John Cardy. Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2005(04):P04010, April 2005.
- [28] Glen Evenbly and Guifre Vidal. Quantum criticality with the multi-scale entanglement renormalization ansatz, 2013.
- [29] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863–2866, Nov 1992.
- [30] Johannes Hauschild and Frank Pollmann. Efficient numerical simulations with Tensor Networks: Tensor Network Python (TeNPy). *SciPost Phys. Lect. Notes*, page 5, 2018. Code available from <https://github.com/tenpy/tenpy>.

- [31] Steven R. White. Density matrix renormalization group algorithms with a single center site. *Physical Review B*, 72(18), November 2005.
- [32] C. Hubig, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, and F. A. Wolf. Strictly single-site dmrg algorithm with subspace expansion. *Physical Review B*, 91(15), April 2015.
- [33] André Winter, Heiko Rieger, Matthias Vojta, and Ralf Bulla. Quantum phase transition in the sub-ohmic spin-boson model: Quantum monte carlo study with a continuous imaginary time cluster algorithm. *Phys. Rev. Lett.*, 102:030601, Jan 2009.
- [34] Juan Román-Roche, Eduardo Sánchez-Burillo, and David Zueco. Bound states in ultrastrong waveguide qed. *Phys. Rev. A*, 102:023702, Aug 2020.

## Anexos

### A. Pretextos teóricos

#### A.1. Ecuación de Dirac

En este primer anexo se va a deducir la ecuación de Dirac (66). La idea de Dirac fue compatibilizar la ecuación de Schrödinger con la relatividad especial.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad \text{con} \quad H = c(\hat{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + \hat{\beta}mc^2 \quad (59)$$

El objetivo es encontrar los operadores  $\hat{\alpha}$  y  $\hat{\beta}$  tales que

$$H^2 = (\hat{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \hat{\beta}mc^2)^2 = E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 \quad (60)$$

Para que esta relación se cumpla es necesario que

$$\beta^2 = \mathcal{I} \quad (61)$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad (62)$$

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \quad (63)$$

Resulta que las tres relaciones anteriores se pueden compactar en la siguiente relación de anticomutación introduciendo las matrices  $\gamma^\mu$  de Dirac

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}\mathcal{I}, \quad (64)$$

las cuales forman una base  $\{\gamma^\mu\} = \{\beta, \alpha_i\}$  con

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathcal{I} & 0 \\ 0 & -\mathcal{I} \end{pmatrix}, \quad (65)$$

donde  $\sigma_i$  son las matrices de Pauli. Así pues, aplicando la equivalencia  $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$  e introduciendo la derivada covariante  $\partial^\mu = (\frac{1}{c}\partial t, -\nabla)$  se obtiene la ecuación de Dirac

$$(i\hbar\gamma^\mu\delta_\mu - mc)\psi = 0 \quad (66)$$

#### A.2. Hamiltoniano de Fermi

Partiendo de la ecuación (7) y usando la relación:

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (67)$$

donde se ha usado  $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + \mathcal{I}\epsilon^{ijk}\sigma_k$ , y aplicandose a los operadores  $\boldsymbol{\pi}$  se obtiene:

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) = \boldsymbol{\pi}^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (68)$$

Donde se ha usado la siguiente relación de producto vectorial:

$$(\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi})^i \phi_A = -i\hbar \left( \frac{-e}{c} \right) \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k - A^k \partial_j) \phi_A \quad (69)$$

$$= i \frac{\hbar e}{c} \epsilon^{ijk} (\partial_j A^k) \phi_A = i \frac{\hbar e}{c} B^i \phi_A \quad (70)$$

con  $B^i = \epsilon^{ijk} \partial_j A^k$ . Sustituyendo en (7) llegamos a la ecuación de Pauli (8)

## B. Guía de ondas

### B.1. Obtención de los acoplos $g_k$

Partiendo de la definición de la función espectral  $J(\omega)$  de la ecuación (29) y suponiendo que la estructura que tienen los acoplamientos  $g_k$  es de la forma

$$g_k \approx C \cdot f(k), \quad (71)$$

donde  $C$  es una constante arbitraria y  $f(k)$  una función desconocida de  $k$ . Entonces

$$J(\omega) = 2\pi \sum_k |C|^2 |f(k)|^2 \delta(\omega - \omega_k). \quad (72)$$

Haciendo el paso al continuo  $\sum_k \equiv \frac{N}{2\pi} \int dk$

$$J(\omega) = 2\pi |C|^2 \frac{N}{2\pi} \int_{-\omega_c/v_g}^{\omega_c/v_g} |f(k)|^2 \delta(\omega - \omega_k) dk = 2|C|^2 N \int_0^{\omega_c/v_g} |f(k)|^2 \delta(\omega - \omega_k) dk \quad (73)$$

y el cambio de variable  $k = \frac{\omega_k}{v_g}$

$$J(\omega) = \frac{2|C|^2 N}{v_g} \int_0^{\omega_c} |f(\omega_k)|^2 \delta(\omega - \omega_k) d\omega_k = \frac{2|C|^2 N}{v_g} \cdot |f(\omega)|^2, \quad (74)$$

igualando con (31) se tiene:

$$\frac{2|C|^2 N}{v_g} \cdot |f(\omega)|^2 = \pi \alpha \omega_c^{1-\chi} \omega^\chi. \quad (75)$$

Por lo que finalmente se obtiene

$$C = \sqrt{\frac{\pi \alpha v_g \omega_c^{1-\chi}}{2N}} \quad f(\omega) = \omega^{\chi/2}, \quad (76)$$

y la expresión para  $g_k$  revirtiendo el cambio de variable, se obtiene la expresión de  $g_k$  en (32)

$$g_k = \sqrt{\frac{\pi \alpha v_g \omega_c^{1-\chi}}{2N}} \omega^{\chi/2} = \sqrt{\frac{\pi \alpha v_g \omega_c^{1-\chi}}{2N}} (v_g |k|)^{\chi/2} = \sqrt{\frac{\pi \alpha v_g^{\chi+1} \omega_c^{1-\chi}}{2N}} |k|^{\chi/2} \quad (77)$$